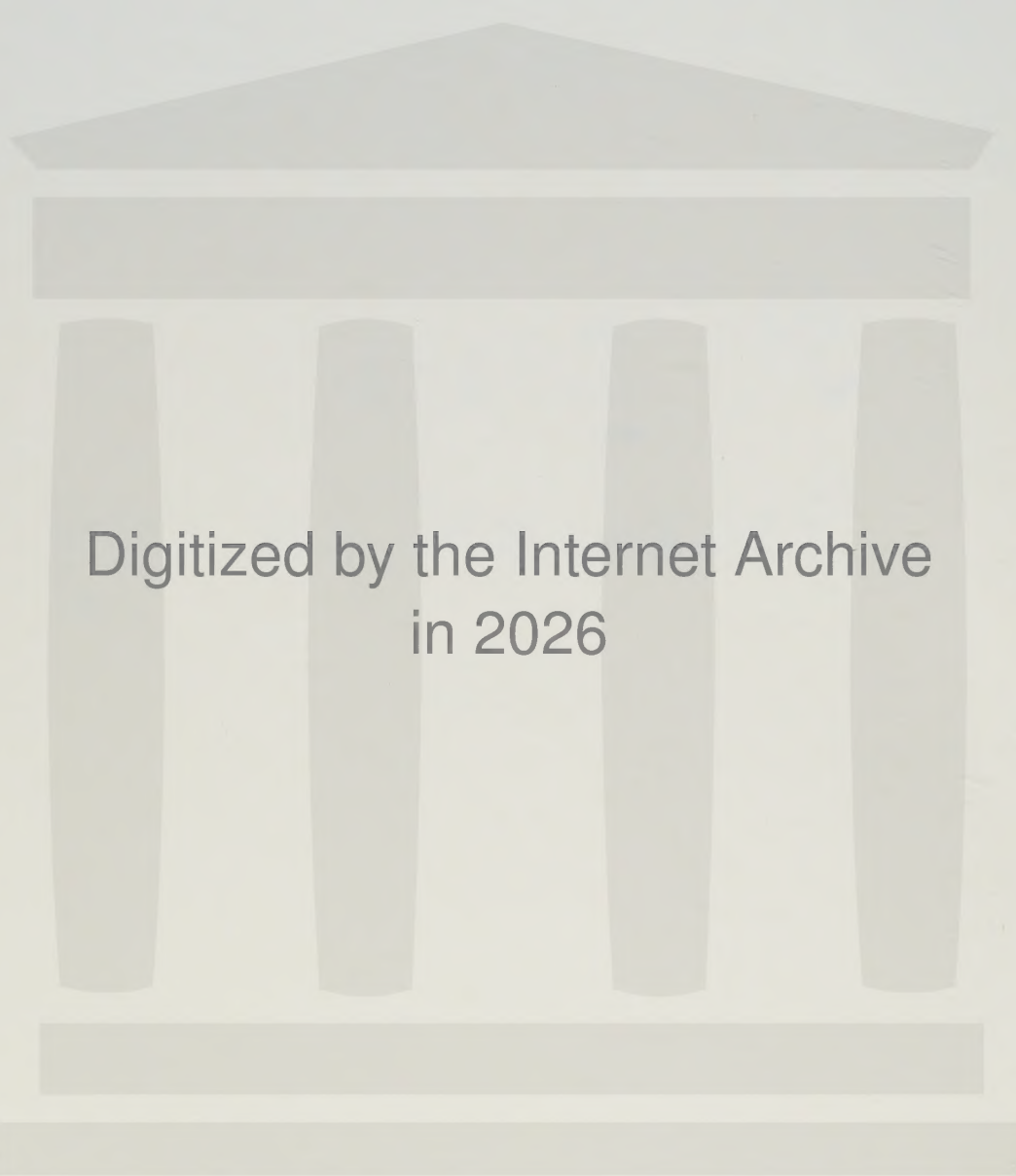


P. Dörre

Frankfurt a.M. 1979

P. 100

Handwritten text, possibly a signature or date, appearing as "1871" and "Handwritten".



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41550809_0016

Mikroskopische Berechnung des Anregungsspektrums und
der suprafluiden Dichte eines kondensierten
Bosonensystems.

Inaugural-Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften

vorgelegt beim Fachbereich Physik

der

Johann Wolfgang Goethe-Universität

zu Frankfurt am Main

von

Peter Dörre

Frankfurt am Main 1979

Uitvoering der Betreftende der Betreftende
der Betreftende der Betreftende

Betreftende

Betreftende

1871

Betreftende der Betreftende der Betreftende

Betreftende der Betreftende der Betreftende

1871

Betreftende der Betreftende der Betreftende

Betreftende der Betreftende der Betreftende



Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereichs Physik
der Universität Frankfurt am Main

Dekan: Prof.Dr. W. Martienssen

Berichterstatter: Prof.Dr. H. Haug

Prof.Dr. R.J. Jelitto

Tag der mündlichen Prüfung: 3. Dez. 1979.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung

- 1.1. Mikroskopische Theorie des supraflüssigen Bose-Systems
- 1.2. Übersicht über diese Arbeit

2. Variationsrechnung für das thermodynamische Potential

- 2.1. Variationsansatz für ein wechselwirkendes Bose-System
- 2.2. Berechnung der oberen Schranke des thermodynamischen Potentials
- 2.3. Durchführung der Variation
- 2.4. Thermodynamische Eigenschaften und Stabilität

3. Ergebnisse der Variationsrechnung

- 3.1. Integralgleichungen der Kondensat-Theorie
- 3.2. Integralgleichungen der Paar-Theorie
- 3.3. Formale Unterschiede zwischen Paar- und Kondensat-Theorie
- 3.4. Numerische Lösung

4. Zwischenbilanz

- 4.1. Diskussion der numerischen Lösungen
- 4.2. Kritik und Überleitung

5. Lineare Antwort auf eine äußere Störung

- 5.1. Allgemeine Theorie der linearen Antwort für $T \neq 0$
- 5.2. Ankopplung der Störung an die Teilchendichte
- 5.3. Reaktion der Dichte auf eine dichteabhängige Störung
- 5.4. Formale Berechnung der Dichte-Korrelationsfunktion

6. Beziehungen von $D^R(\vec{k}, \omega)$ zu anderen Vielteilchenfunktionen

- 6.1. Dichte-Korrelationsfunktionen
- 6.2. Dynamischer Strukturfaktor $S(\vec{q}, \omega)$
- 6.3. Dynamische Suszeptibilität und Polarisationsfunktion

7. Berechnung von $D^R(\vec{k}, \omega)$ für ein kondensiertes Bose-System

- 7.1. Formale Ring-Approximation für die dielektrische Funktion
- 7.2. Verallgemeinerte HF-Näherung für die Dichte-Korrelationsfunktion
- 7.3. Diskussion des Ergebnisses
- 7.4. Langwelliger und statischer Grenzfall

8. Anregungsspektrum eines kondensierten Bose-Systems

- 8.1. Dispersionsrelation der energetisch niedrigsten Anregungen
- 8.2. Ergebnisse für das Anregungsspektrum
- 8.3. Eigenschaften des Spektrums

9. Supraflüssigkeiten und Supraleiter in äußeren Feldern

- 9.1. Zwei-Flüssigkeitsmodell
- 9.2. Idealisiertes Rotationsexperiment für Supraflüssigkeiten
- 9.3. Analogie zum Supraleiter

10. Strom-Korrelationsfunktion und suprafluide Dichte

- 10.1. Stromoperator in Anwesenheit eines äußeren Feldes
- 10.2. Lineare Antwort auf ein schwaches Wirbelfeld
- 10.3. Berechnung der Strom-Korrelationsfunktion
- 10.4. Berechnung der suprafluiden Dichte

11. Diskussion der Ergebnisse

- 11.1. Suprafluide Dichte
- 11.2. Anregungsspektrum
- 11.3. Zusammenfassung

12. Literatur

Anhang A Berechnung der Dichte-Korrelationsfunktion mit
Temperatur-Green'schen Funktionen

Anhang B Retardierte Dichte- und Strom-Korrelationsfunktion
in supraflüssigen Bose- und supraleitenden Fermi-
systemen.

1. Einleitung

1.1 Mikroskopische Theorie des supraflüssigen Bose-Systems

Bei sehr tiefen Temperaturen kann die Relation für die Gesamtteilchenzahl in einem idealen Bose-Gas nur befriedigt werden, wenn man eine makroskopische Besetzung des niedrigsten Impulszustandes zuläßt. Diese Kondensation im Impulsraum ist als Bose-Einstein-Kondensation (BEC) bekannt. Seit der Entdeckung der supraflüssigen Phase von ^4He , des Helium II, versucht man daher, die Suprafluidität als Konsequenz einer durch das Wechselwirkungspotential modifizierten Kondensation zu erklären.

Obwohl auf der phänomenologischen Ebene die Eigenschaften einer Bose-Supraflüssigkeit, wie des Helium II, recht gut verstanden sind ¹⁾, hat die mikroskopische Theorie des supraflüssigen Zustandes noch nicht jenes zufriedenstellende Niveau erreicht, wie etwa die Theorie des supraleitenden Fermisystems seit der Arbeit von Bardēen, Cooper und Schrieffer (BCS) ²⁾. Der erste Versuch einer mikroskopischen Erklärung des supraflüssigen Bose-Systems geht auf Bogolubov ³⁾ zurück. Er führte c-Zahlen für die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren des niedrigsten Impulszustandes $\vec{k} = 0$ ein, d.h. $c_0^+ \sim N_0^{1/2}$, wobei N_0 die (makroskopische) Zahl der Teilchen des Kondensats ist. Unter der Voraussetzung, daß N_0 nahe bei der Gesamtteilchenzahl N liegt, gelang ihm die Diagonalisierung des verbleibenden genäherten Hamiltonoperators durch eine Transformation auf Quasiteilchen, die auch eine Paarung in entgegengesetzten Impulszuständen enthält. Das resultierende Quasiteilchenspektrum zeigt eine lineare k -Abhängigkeit für kleine Impulse $\vec{k}$, wie sie von Landau ⁴⁾ erstmals für das Helium-Spektrum postuliert und später experimentell beobachtet wurde ⁵⁾.

Eine allgemeine Formulierung dieser Kondensat-Theorie wurde von Beliaev ⁶⁾ mit Hilfe eines Gleichungssystems für normale und anomale Green'sche Funktionen gegeben. Tolmachev ⁷⁾ löste die temperaturabhängige Version der Beliaev-Gleichungen in der Hartree-Fock-Bogolubov-Approximation und zeigte, daß man dieselben Lösungen auch aus dem Bogolubov'schen statistischen Variationsprin-

zip ⁸⁾ erhält.

Die c-Zahl-Theorien mit hohem Kondensatanteil, d.h. $(N-N_0)/N \ll 1$, sind von Neutronenstreuexperimenten an Helium II in Frage gestellt worden; diese Experimente ergaben einen geringen (oder gar verschwindenden) Kondensatanteil N_0/N ⁹⁾ (ihre Interpretation wird jedoch kompliziert durch die Wechselwirkung in den Endzuständen ¹⁰⁾).

Die Erfolge der BCS-Theorie führten zu analogen Theorien ohne c-Zahl-Kondensat für supraflüssige Bose-Systeme. Evans und Imry ¹¹⁾ verbesserten eine von Valatin und Butler ¹²⁾ veröffentlichte Paar-Theorie für Bosonen durch eine modifizierte Behandlung der Besetzungszahl n_0 zum niedrigsten Impuls $\vec{k}=0$. Diese Paartheorie wurde durch Linearisierung der Bewegungsgleichung abgeleitet und enthält wie die Bogolubovsche Theorie eine Paarung in Zuständen $(\vec{k}, -\vec{k})$ (das Bose-Analogon zum Cooper-Paar), aber keinen c-Zahl-Ansatz für $\vec{k}=0$ mehr. Für die Existenz kohärenter Lösungen (d.h. Lösungen mit nicht verschwindender Paar-Amplitude) ist das Vorhandensein eines attraktiven Potentialanteils wesentlich - im Gegensatz dazu liegt bei der Bogolubovschen Theorie die Betonung auf einem abstoßenden Potentialanteil, der für die Stabilität der kondensierten Phase vorausgesetzt werden muß (das Potential darf auch attraktive Anteile enthalten, doch muß die Fourier-Komponente $W_0 > 0$ sein). Die numerischen Rechnungen zu dieser Paar-Theorie mit BEC ergeben mit einem geeigneten Pseudopotential eine gute qualitative Übereinstimmung mit der bekannten "Phonon-Roton"-Form des Helium-Spektrums, aber einen Phasenübergang von 1. statt von 2. Ordnung, wie er beim Übergang von der normalen Flüssigkeit (Helium I) zu Helium II vorliegt.

Auf der Suche nach weiteren Lösungen der Paar-Theorie entdeckten Evans und Harris ¹³⁾ die "kondensatfreie Paar-Theorie" mit verschwindender Besetzung n_0 des (Bose-Einstein-) Kondensats. Zu dieser Theorie existieren Lösungen bei stark abstoßenden Potentialen; sie liefert einen stetigen Phasenübergang, ihr Quasiteilchenspektrum weist aber eine "Lücke" auf - ebenso wie das Quasiteilchenspektrum der Kondensat-Theorie (dies ist schon aus der Arbeit von Tolmachev ⁷⁾ ersichtlich, von diesem Autor aber nicht herausgestellt worden).

Wegen der Lückenfreiheit der ursprünglichen Bogolubovschen Theorie und der Paartheorie mit BEC wurde im allgemeinen das Anregungsspektrum von Helium II mit dem Spektrum einer Einteilchen-Theorie identifiziert. Die selbstkonsistent berechneten Ergebnisse mit "Energielücke" machen aber eine Revision dieses Standpunktes erforderlich.

In einer kürzlich erschienenen Arbeit ¹⁴⁾ wird die Existenz eines lückenfreien phononenartigen Spektrums durch Berücksichtigung von Restwechselwirkungen zwischen den Quasiteilchen und die Form dieses Spektrums qualitativ diskutiert.

Ein anderer Zugang zur Beschreibung des supraflüssigen Helium ist von Feynman ¹⁵⁾ vorgeschlagen worden. Er vermied die Schwierigkeit, für das interatomare Potential eine explizite Form vorzusetzen, dadurch, daß er eine einfache Beziehung zwischen den Wellenfunktionen des Grundzustandes und der angeregten Zustände annahm. Die unbekannte Grundzustandswellenfunktion wurde dann mit Hilfe des gemessenen Strukturfaktors $S(\vec{q})$ eliminiert. Diese semiphänomenologische Theorie wurde von Feynman und Cohen ¹⁶⁾ und anderen Autoren durch das "backflow"-Konzept verbessert (was der Einbeziehung der Teilchenzahlerhaltung entspricht). Wir werden auf diesen Zugang nicht näher eingehen.

Während die Elementaranregungen in Helium II meist der Anwesenheit eines Kondensats zugeschrieben werden, schlug Pines ¹⁷⁾ vor, sie mit dem Polarisationsseffekt zu erklären, der durch die starken kurzreichweitigen Korrelationen zustande kommt. Die Anregungsmoden eines neutralen Bose-Systems sind dann in Analogie zu den Plasmaschwingungen in geladenen Fermi-Systemen zu sehen. Bei der Berechnung des Anregungsspektrums wird von einem phänomenologischen Polarisationspotential ausgegangen ¹⁸⁾ und auf diese Weise quantitative Übereinstimmung mit dem gemessenen Spektrum erreicht.

1.2. Übersicht über diese Arbeit

In dieser Arbeit soll das Variationsprinzip dazu benutzt werden, die verschiedenen mikroskopischen Theorien für supraflüssige Bosonensysteme selbstkonsistent aus einem einheitlichen Verfahren abzuleiten. Da das Variationsprinzip zugleich eine Größe liefert, die man als thermodynamisches Potential interpretieren darf, kann ebenfalls entschieden werden, welche Theorie die thermodynamisch stabile Phase bei tiefen Temperaturen beschreibt. Weiterhin stellen wir uns auf den Standpunkt, daß die dynamischen Eigenschaften des Systems (wie z.B. das Anregungsspektrum) aus einer geeigneten Zweiteilchen-Funktion des Systems gewonnen werden müssen, d.h. aus einer Approximation, die über die durch das Variationsprinzip definierte Quasiteilchentheorie (Einteilchen-Theorie) hinausgeht.

In Kapitel 2 leiten wir mit Hilfe des Bogolubov'schen Variationsverfahrens (zu dem es im Grenzfall großer Systeme noch keine Verbesserung gibt ¹⁹⁾) eine allgemeine Einteilchentheorie für kondensierte Bosonensysteme her. Entscheidend ist dabei die Wahl eines geeigneten Vergleichs-Hamiltonoperators H_t , in dem möglichst viele der relevanten Vielteilcheneffekte des exakten Hamiltonoperators eingebaut sein sollen. Die Anwendung des Variationsprinzips ist äquivalent zu einer Berechnung mit Einteilchen-Green'schen Funktionen, aber einfacher durchzuführen, und liefert zudem sofort Aussagen über thermodynamische Eigenschaften des Systems.

In Kapitel 3 spezialisieren wir diese allgemeine Einteilchen-Theorie auf die Kondensat-Theorie (Annahme eines nichtverschwindenden c-Zahl-Anteils) und die beiden "Paar-Theorien" (verschwindender c-Zahl-Anteil) : die Paar-Theorie mit BEC und die kondensatfreie Paar-Theorie. Mit Hilfe eines einfachen Modell- oder Pseudo-Potentials, das die wesentlichen Züge des interatomaren Helium-Potentials enthält, lösen wir die Integralgleichungen der jeweiligen Theorie numerisch.

In Kapitel 4 stellen wir die Ergebnisse ²⁰⁾ dar und diskutieren sie im Hinblick auf die Übereinstimmung mit experimentellen Daten sowie auf thermodynamische Stabilität.

Die Tatsache, daß die energetisch begünstigte Kondensat-Theorie nicht das experimentelle Anregungsspektrum liefert, motiviert die Aufstellung einer Zweiteilchen-Theorie für die dynamischen Eigenschaften des Systems. Dies tun wir in den Kapiteln 5 bis 10 mit dem Schwerpunkt, das Anregungsspektrum einer Supraflüssigkeit zumindest qualitativ aus einer mikroskopischen Theorie abzuleiten. Die Art und Weise unseres Vorgehens beschreiben wir im Abschnitt 4.2.

Schließlich stellen wir im Kapitel 11 unsere Ergebnisse zusammenfassend dar. Im Anhang A führen wir (als alternative Methode) die Berechnung der Dichte-Korrelationsfunktion mit Hilfe von Temperatur-Greenschen Funktionen durch. Anhang B enthält Einzelheiten aus der Berechnung von Dichte- und Strom-Korrelationsfunktion und stellt zum Vergleich die Ergebnisse für diese Funktionen in supraflüssigen Bose- und supraleitenden Fermisystemen gegenüber.

2. Variationsrechnung für das thermodynamische Potential

2.1. Variationsansatz für ein wechselwirkendes Bose-System

Das homogene Bosonensystem werde durch folgenden Hamiltonoperator beschrieben

$$H = \sum (\epsilon_k - \mu) c_k^\dagger c_k + \frac{1}{2} \sum W_q c_{k+q}^\dagger c_{k-q}^\dagger c_k c_k. \quad (2.1)$$

W_q sind dabei die Fourierkomponenten eines isotropen und instantanen Wechselwirkungspotentials

$$W_q = \int d^3r \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{r}) V(r) = W_{-q}. \quad (2.2)$$

Bei der Beschreibung realer Systeme (wir wollen uns auf ^4He beziehen) werden wir unter dem Zwei-Teilchen-Potential stets ein "effektives" Potential verstehen, das bereits Vielteilcheneffekte (etwa im Sinne einer T-Matrix-Approximation) enthält. Die wesentliche Modifizierung besteht in der Ersetzung des "hard core" (beim "nackten" Potential) durch einen für $r \rightarrow 0$ endlichen abstoßenden Anteil, während der langreichweitige attraktive Anteil praktisch unverändert bleibt ¹⁸⁾.

Das statistische Variationsprinzip ⁸⁾ gestattet die Berechnung einer oberen Schranke $\tilde{\Omega}$ für das (großkanonische) thermodynamische Potential $\Omega(T, V, \mu)$ des Systems. Diese obere Schranke ist definiert durch das Minimum von

$$\tilde{\Omega} = \Omega_t + \langle H - H_t \rangle_t, \quad (2.3)$$

wobei H_t ein Vergleichs- oder Test-Hamiltonoperator ist, der von den Variationsparametern abhängt. Die Mittelwerte werden mit Hilfe des statistischen Operators $\rho_t = \exp(-\beta H_t) / \text{tr} \exp(-\beta H_t)$ berechnet

$$\langle \dots \rangle_t = \text{tr} (\rho_t \dots), \quad (2.4)$$

Ω_t ist das thermodynamische Potential des Test-Hamiltonoperators:

$$\Omega_t = -\frac{1}{\beta} \ln \text{tr} \exp(-\beta H_t), \quad (2.5)$$

β die inverse Temperatur (wir messen in Einheiten von k_B).

Die Güte dieses Approximationsverfahrens wird entscheidend durch die Wahl eines geeigneten Test-Hamiltonoperators bestimmt. Andererseits schränkt die Forderung nach Berechenbarkeit die Menge der

in Frage kommenden H_t stark ein. Wir wählen einen Molekularfeld-Ansatz

$$H_t = \sum E_k \bar{c}_k^+ \bar{c}_k, \quad (2.6)$$

der ein System wechselwirkungsfreier Quasiteilchen beschreibt. Die als physikalisch relevant angesehenen Vielteilchenprozesse stecken in der Transformation der Teilchen-Erzeugungs- und -Vernichtungsoperatoren c^+, c auf die entsprechenden Quasiteilchen-Operatoren $\bar{c}^+, \bar{c}$

$$c_k^+ = u_k^* \bar{c}_k^+ + v_k^* \bar{c}_{-k} + \zeta^* \delta_{k0}. \quad (2.7)$$

Durch diese Transformation wird eine mögliche Kondensation im $\vec{k}=0$ -Zustand durch die komplexe c-Zahl ζ^* für c_0^+ ebenso berücksichtigt wie eine Bildung von Teilchenpaaren in Zuständen mit entgegengesetzten Impulsen (Cooper-Paare). u_k und v_k sind die dem letzteren Prozess zugeordneten Koeffizienten. Aus der Bedingung, daß die Transformation (2.7) kanonisch sei, folgt die Relation

$$|u_k|^2 - |v_k|^2 = 1. \quad (2.8)$$

H_t (und damit $\tilde{\Omega}$) ist also als eine Funktion der Variationsparameter $u_k, u_k^*, v_k, v_k^*, \zeta, \zeta^*$ und E_k aufzufassen.

2.2. Berechnung der oberen Schranke des thermodynamischen Potentials

Zur Berechnung von $\tilde{\Omega}$ muß der exakte Hamiltonoperator H mit Hilfe von Gl. (2.7) (und der komplex-konjugierten Beziehung) auf Quasiteilchen umgeschrieben werden. Die so entstandenen Erwartungswerte von Produkten von Quasiteilchenoperatoren können dann mit Hilfe des temperaturabhängigen Wick'schen Theorems berechnet werden, z.B.

$$\langle \bar{c}_{\vec{k}+\vec{q}}^+ \bar{c}_{\vec{p}-\vec{q}}^+ \bar{c}_{\vec{p}} \bar{c}_{\vec{k}} \rangle_t = \bar{n}_{|\vec{k}+\vec{q}|} \bar{n}_{\vec{k}} \delta_{\vec{k}+\vec{q}, \vec{p}} + \bar{n}_{\vec{k}} \bar{n}_{\vec{p}} \delta_{\vec{q}0}, \quad (2.9)$$

mit

$$\bar{n}_{\vec{k}} \equiv \langle \bar{c}_{\vec{k}}^+ \bar{c}_{\vec{k}} \rangle_t = [\exp(\beta E_{\vec{k}}) - 1]^{-1}. \quad (2.10)$$

Für $\tilde{\Omega}$ erhalten wir

$$\begin{aligned} \tilde{\Omega} = & \beta^{-1} \sum \ln [1 - \exp(-\beta E_{\vec{k}})] + \sum (\varepsilon_{\vec{k}} - \mu) (n_{\vec{k}} + \delta_{\vec{k}0} \zeta \zeta^*) \\ & + \frac{1}{2} \sum \{ (W_0 + W_{|\vec{k}-\vec{p}|}) n_{\vec{k}} n_{\vec{p}} + W_{|\vec{k}-\vec{p}|} \chi_{\vec{k}}^* \chi_{\vec{p}} \} \\ & + \zeta \zeta^* \sum (W_0 + W_{\vec{k}}) n_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \sum W_{\vec{k}} (\chi_{\vec{k}} \zeta^{*2} + \chi_{\vec{k}}^* \zeta^2) \\ & + \frac{1}{2} (\zeta \zeta^*)^2 W_0 - \sum E_{\vec{k}} \bar{n}_{\vec{k}}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Dabei haben wir folgende Abkürzungen eingeführt

$$n_{\vec{k}} = |u_{\vec{k}}|^2 \bar{n}_{\vec{k}} + |v_{\vec{k}}|^2 (\bar{n}_{\vec{k}} + 1) \quad (2.12)$$

$$\chi_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} (2\bar{n}_{\vec{k}} + 1) \quad (2.13)$$

(Es gilt $\langle c_{\vec{k}}^+ c_{\vec{k}} \rangle_t = n_{\vec{k}} + \zeta \zeta^* n_{\vec{k}}$).

2.3. Durchführung der Variation

Mit der Nebenbedingung (2.8) suchen wir das Minimum des Ausdrucks

$$\tilde{\mathcal{L}} + \sum \lambda_k (|u_k|^2 - |v_k|^2 - 1)$$

bzgl. aller Variationsparameter. Die λ_k sind dabei die Lagrange-Multiplikatoren für die Nebenbedingungen. Gleichzeitig mit der Variation muß die thermodynamische Relation für die Gesamtteilchenzahl erfüllt sein

$$N = -\partial \tilde{\mathcal{L}} / \partial \mu, \quad (2.14)$$

was sofort ergibt

$$N = \zeta \zeta^* + \sum n_k. \quad (2.15)$$

Nach Elimination von λ_k lassen sich die Ergebnisse der Variation nach E_k und den Koeffizienten u_k^*, v_k^*, u_k, v_k in folgender kompakten Form zusammenfassen

$$E_k = \tilde{\varepsilon}_k (|u_k|^2 + |v_k|^2) + \Delta_k u_k^* v_k^* + \Delta_k^* u_k v_k, \quad (2.16)$$

$$0 = 2 \tilde{\varepsilon}_k u_k v_k + \Delta_k (|u_k|^2 + |v_k|^2), \quad (2.17)$$

$$0 = 2 \tilde{\varepsilon}_k u_k^* v_k^* + \Delta_k^* (|u_k|^2 + |v_k|^2). \quad (2.18)$$

Dabei haben wir die Hartree-Fock-Quasiteilchenenergie $\tilde{\varepsilon}_k$ und den Kohärenzparameter Δ_k eingeführt durch

$$\tilde{\varepsilon}_k \equiv \partial \tilde{\mathcal{L}} / \partial n_k = \varepsilon_k - \mu + N W_0 + \sum W_{|\vec{E}-\vec{p}|} n_p + N_0 W_k, \quad (2.19)$$

$$\Delta_k \equiv \partial \tilde{\mathcal{L}} / \partial \chi_k^* = \sum W_{|\vec{E}-\vec{p}|} \chi_p + N_0 W_k \exp(2i\varphi), \quad (2.20)$$

und
$$\zeta = N_0^{1/2} \exp(i\varphi). \quad (2.21)$$

Da wir bei der Variation nach 4 unabhängigen Parametern (E_k und 3 der 4 Parameter u_k^*, v_k^*, u_k, v_k wegen der Nebenbedingung (2.8)) nur 3 Gln. (2.16)-(2.18) erhalten haben, können wir z.B. noch über die Koeffizienten u_k usw. dahingehend verfügen, daß wir fordern

$$u_k^* v_k^* = u_k v_k \quad (2.22)$$

Damit folgt nach den Gln. (2.17) und (2.18) sofort

$$\Delta_k = \Delta_k^* = \text{Re } \Delta_k$$

Dies entspricht der Wahl von reellen Koeffizienten u_k, v_k ; dann haben wir mit den "Selbstkonsistenzgleichungen" (2.16) und (2.17)

sowie der Nebenbedingung (2.8) 3 Gln. zur Bestimmung der 3 Unbekannten E_k, u_k, v_k . Die Lösungen lassen sich schreiben als

$$|u_k|^2 = \frac{1}{2} (\tilde{\epsilon}_k / E_k + 1) = 1 + |v_k|^2, \quad (2.23)$$

$$u_k v_k = -\frac{1}{2} \Delta_k / E_k. \quad (2.24)$$

Mit der Abkürzung

$$B_k = 2\bar{n}_k + 1 = \coth(\frac{1}{2}\beta E_k) \quad (2.25)$$

erhalten wir durch Einsetzen der Lösungen in die Definitionsgln. (2.12) und (2.13)

$$\chi_k = -\frac{1}{2} \Delta_k B_k / E_k, \quad (2.26)$$

$$n_k = \frac{1}{2} (\tilde{\epsilon}_k B_k / E_k - 1). \quad (2.27)$$

Schließlich liefert die Nebenbedingung (2.8) noch die Quasiteilchenenergie

$$E_k = (\tilde{\epsilon}_k^2 - \Delta_k^2)^{1/2}. \quad (2.28)$$

Die noch anstehende Variation nach den c-Zahlen ζ und ζ^* liefert z.B.

$$0 = \frac{\partial \tilde{\mathcal{E}}}{\partial \zeta^*} = \int \left[-\mu + \sum (w_0 + w_k) n_k + \zeta \zeta^* w_0 + \sum w_k \chi_k e^{-2i\varphi} \right]. \quad (2.29)$$

Diese Gleichung hat offenbar zwei verschiedene Typen von Lösungen. Der erste Typ ist $\zeta \neq 0$; in diesem Falle bestimmt sich μ aus Gl. (2.29). Wir bezeichnen diese Art von Lösungen als "Kondensat-Theorie", da sie mit den Ergebnissen der selbstkonsistenten temperaturabhängigen Version von Bogolubov's Theorie für ein entartetes Bose-System übereinstimmen.- Der zweite Typ von Lösungen ergibt sich für $\zeta \equiv 0$. Wir werden im nächsten Kapitel sehen, daß diese Lösungen mit der "Paar-Theorie" von Evans und Imry¹¹⁾ bzw. der "kondensatfreien Paar-Theorie" von Evans und Harris¹³⁾ übereinstimmen. Zu diesen beiden Theorien existieren Lösungen für Potentiale mit attraktiven Anteilen.

2.4. Thermodynamische Eigenschaften und Stabilität

Ehe wir zu den speziellen Lösungen übergehen, wollen wir zwei wichtige thermodynamische Eigenschaften ableiten, aus deren Verhalten am kritischen Punkt die Ordnung des Phasenübergangs hervorgeht, nämlich die Entropie und die spezifische Wärme. Die Ergebnisse des Variationsverfahrens bilden zusammen mit den ersten Ableitungen von $\tilde{\Omega}$ eine thermodynamisch konsistente Approximation²¹⁾. Für die in diesem Approximationsschema abgeleitete spezifische Wärme $\tilde{C}_V$ gilt, daß sie stets nicht-negativ ist. Zur Berechnung von $\tilde{C}_V$ und der Entropie $\tilde{S}$ schreiben wir $\tilde{\Omega}$ in der Form

$$\tilde{\Omega} = \langle H' \rangle_t - \langle \mu N \rangle_t - \beta^{-1} (\ln \text{tr } g_t + \langle \beta H_t \rangle_t), \quad (2.30)$$

wobei der großkanonische Term μN explizit aus dem Hamiltonoperator gezogen wurde:

$$H = H' - \mu N.$$

Wegen der thermodynamischen Konsistenz sind die durch partielle Ableitungen gewonnenen Größen gleich den durch Identifizierung gewonnenen; es gilt mit ($\tilde{U}$ innere Energie)

$$\tilde{\Omega} = \tilde{U} - \mu N - T\tilde{S} \quad (2.31)$$

für die innere Energie

$$\tilde{U} = \langle H' \rangle_t, \quad (2.32)$$

für die Entropie

$$\begin{aligned} \tilde{S} &= \ln \text{tr } g_t + \langle \beta H_t \rangle_t \\ &= \sum \left\{ -\ln [1 - \exp(-\beta E_k)] + \beta E_k \bar{n}_k \right\}, \end{aligned} \quad (2.33)$$

sowie für die spezifische Wärme

$$\tilde{C}_V = T \partial \tilde{S} / \partial T = \frac{1}{4} \beta^2 \sum E_k^2 (\beta_k^2 - 1). \quad (2.34)$$

Die Gln. (2.33) und (2.34) hängen nur von β und E_k ab und gelten daher in dieser allgemeinen Form für alle Lösungen. (Ergebnisse s. Kapitel 4.)

Bei vorgegebenen T, V, μ ist das thermodynamische Potential im

Gleichgewicht im Minimum. Für Helium ist es jedoch sinnvoller, die experimentell einfacher zugängliche Dichte $\rho = N/V$ vorzugeben. Dann muß im Gleichgewicht die (Helmholtz'sche) freie Energie

$$\tilde{F}(T, V, N) = \tilde{\mathcal{L}}(T, V, \mu) + \mu N \quad (2.35)$$

minimal sein. Durch Berechnung der freien Energien in den einzelnen Theorien kann also entschieden werden, welche Theorie die physikalisch stabile Phase liefert.

3. Ergebnisse der Variationsrechnung

In diesem Kapitel stellen wir die zu lösenden Systeme von Integralgleichungen für die Kondensat-Theorie sowie für die beiden möglichen Formen der Paar-Theorie dar. Durch Verwendung eines einfachen Pseudopotentials gelingt die Überführung dieser Gleichungen in ein System nichtlinearer algebraischer Gleichungen, das mit Hilfe eines verallgemeinerten Newton-Verfahrens ²²⁾ gelöst werden kann.

3.1. Integralgleichungen der Kondensat-Theorie

Für nichtverschwindendes $N_0 = \zeta \zeta^*$ bestimmt sich μ nach Gl. (2.29) zu

$$\mu = \sum (W_0 + W_k) n_k + N_0 W_0 + \exp(-2i\varphi) \sum W_k \chi_k. \quad (3.1)$$

Mit Hilfe von Gl. (2.20) und der Definition einer "Selbstenergie"

$$\xi_k \equiv \sum W_{|\vec{k}-\vec{p}|} n_p \quad (3.2)$$

läßt sich Gl. (3.1) weiter vereinfachen zu

$$\mu = (N - N_0) W_0 + \xi_0 + \exp(-2i\varphi) \Delta_0. \quad (3.3)$$

Einsetzen von Gl. (2.26) in (2.20) liefert eine Integralgleichung für Δ_k :

$$\Delta_k = -\frac{1}{2} \sum W_{|\vec{k}-\vec{p}|} \Delta_p B_p / E_p + N_0 W_k \exp(2i\varphi) \quad (3.4)$$

Da wir Δ_k reell gewählt haben, ist $\exp(2i\varphi) = \cos 2\varphi = \pm 1$. Die beiden Gln. (3.3) und (3.4) sind die einzigen Gleichungen, in denen der Phasenfaktor $\exp(-2i\varphi)$ vorkommt. Indem wir eine neue (reelle) Größe

$$\Delta'_k \equiv \exp(-2i\varphi) \Delta_k \quad (3.5)$$

eingeführen, können wir den Phasenfaktor explizit eliminieren (wir lassen künftig auch wieder den Strich weg).

Es bietet sich an, statt der ursprünglichen Parameter E_k, u_k und N_0 etwa N_0, Δ_k, ξ_k als Lösungsparameter aufzufassen. Dann lauten die zu lösenden Integralgleichungen:

$$N = N_0 + \sum n_k, \quad (3.6)$$

$$\Delta_k = N_0 W_k - \frac{1}{2} \sum W_{|\vec{k}-\vec{p}|} \Delta_p B_p / E_p, \quad (3.7)$$

$$\xi_k = \sum W_{|\vec{k}-\vec{p}|} n_p, \quad (3.8)$$

mit den zusätzlichen "Hilfsgleichungen"

$$n_k = \frac{1}{2} (\tilde{\xi}_k B_k / E_k - 1), \quad (3.9)$$

$$B_k = \coth(\frac{1}{2} \beta E_k), \quad (3.10)$$

$$E_k = (\tilde{\xi}_k^2 - \Delta_k^2)^{1/2}, \quad (3.11)$$

$$\tilde{\xi}_k = \varepsilon_k - \mu + N W_0 + \xi_k + N_0 W_k, \quad (3.12)$$

$$\mu = (N - N_0) W_0 + \xi_0 + \Delta_0. \quad (3.13)$$

Dieser Satz von Gleichungen ist für die Kondensat-Theorie selbst-konsistent zu lösen.

Von besonderem Interesse ist das Verhalten von E_k für $k \rightarrow 0$. Es gilt dann

$$E_0^2 = 4 N_0 W_0 (N_0 W_0 - \Delta_0), \quad (3.14)$$

d.h. das Quasiteilchenspektrum ist nur dann "lückenfrei", wenn $N_0 W_0 = \Delta_0$ ist - wie wir in Kapitel 4 sehen werden, erfüllt die physikalisch stabile Phase nicht diese Beziehung. Üblicherweise bestimmt man in einer Hartree-Fock-Bogolubov-Approximation zur Lösung der Beliaev-Gleichungen das chemische Potential mit Hilfe der Hugenholtz-Pines-Relation ²³⁾

$$\mu = \Sigma_{11}(0,0) - \Sigma_{02}(0,0), \quad (3.15)$$

in der $\Sigma_{11}(0,0)$ und $\Sigma_{02}(0,0)$ die normalen und anomalen Selbst-energien für verschwindende Impulse und Energien sind. Dieses Verfahren garantiert ein lückenloses Quasiteilchenspektrum. Wir werden auf diesen Punkt in Abschnitt 3.3 noch weiter eingehen.

3.2. Integralgleichungen der Paar-Theorien

Für verschwindenden c-Zahl-Anteil ζ kann Gl. (2.24) natürlich nicht mehr zur Berechnung von μ verwendet werden. Evans und seine Mitarbeiter ^{11),13),24)} haben gezeigt, daß dann zwei Möglichkeiten existieren, μ im Rahmen der Paar-Theorie zu bestimmen. Beide Möglichkeiten liefern nichttriviale Lösungen für bestimmte Arten von Pseudopotentialen mit attraktiven Anteilen.

Ein gangbarer Weg, μ zu berechnen, besteht in der Forderung nach einem lückenfreien Quasiteilchenspektrum für $k \rightarrow 0$, d.h.

$$E_{k \rightarrow 0} \rightarrow 0.$$

Um diesen Weg zu beschreiten, genügt es nicht, in den Integral- und Hilfsgleichungen (3.6) - (3.12) lediglich $N_0 \equiv 0$ zu setzen. Für $k = 0$ divergiert die Besetzungszahl Gl. (2.27) wegen

$$B_0 = \coth\left(\frac{1}{2}\beta E_0\right) \xrightarrow{E_0 \rightarrow 0} \frac{2}{\beta E_0} \quad (3.16)$$

wie

$$n_0 = \tilde{\xi}_0 / (\beta E_0^2). \quad (3.17)$$

Um diese Divergenz zu beseitigen, müssen wir n_0 als zusätzlichen Parameter in die Integralgleichungen einführen und entsprechend den $\vec{k}=0$ -Term aus den Summen herauslassen. Wir haben also N_0 eliminiert und dafür die Besetzungszahl n_0 des Bose-Einstein-Kondensats erhalten. Die Forderung $E_0 \rightarrow 0$ führt nun aber auf die Bedingung

$$\tilde{\xi}_0 = +|\Delta_0| = \Delta_0 \operatorname{sgn} \Delta_0, \quad (3.18)$$

wobei $\operatorname{sgn} x = \pm 1$ für $x > < 0$ die Signum-Funktion definiert. Das Vorzeichen wird nach Gl. (3.17) dadurch diktiert, daß n_0 eine nichtnegative Größe ist. Daraus folgt

$$\mu = NW_0 + \xi_0 - |\Delta_0|. \quad (3.19)$$

Die Integralgleichungen dieser Paar-Theorie mit Bose-Einstein-Kondensat (BEC) lauten dann (n_0, Δ_k, ξ_k Lösungsparameter)

$$N = n_0 + \sum' n_k, \quad (3.20)$$

$$\xi_k = n_0 W_k + \sum' W_{|\vec{k}-\vec{p}|} n_p, \quad (3.21)$$

$$\Delta_k = -n_0 W_k \operatorname{sgn} \Delta_0 - \frac{1}{2} \sum' W_{|\mathbf{k}-\mathbf{p}|} \Delta_p B_p / E_p, \quad (3.22)$$

und sind zusammen mit den Hilfsgleichungen (3.9)-(3.12) mit $N_0 \equiv 0$ und der Ersatzgleichung (3.19) für μ auszuwerten.

In der Forderung $E_0 = 0$ bzw. dem Ansatz einer makroskopischen Besetzungszahl n_0 liegt eine gewisse Willkür, die erst dann gerechtfertigt erscheint, wenn es gelingt, Lösungen dieser Theorie zu finden, ohne dabei auf irgendwelche Inkonsistenzen zu stoßen.

Solche Lösungen wurden zuerst von Evans und Imry ¹¹⁾ gefunden. Wir bezeichnen diese Version der Paar-Theorie im folgenden mit P_{BEC} .

Wie wir im nächsten Kapitel sehen werden, existieren für Potentiale mit hinreichend abstoßendem "core" keine Lösungen mit makroskopischem n_0 (bzw. $E_0 = 0$) mehr. Für $E_0 > 0$ ist aber auf einer makroskopischen Skala $n_0/N = 0$. Dann kann μ weder aus Gl. (2.29) noch aus (3.19) gewonnen werden. Wegen $N_0 = n_0 = 0$ können wir aber nun μ, Δ_k, ξ_k als Lösungsparameter auffassen. Unser System von Integralgleichungen vereinfacht sich für diese kondensatfreie Paar-Theorie (im folgenden als P-Theorie zitiert) auf

$$N = \sum n_k, \quad (3.23)$$

$$\xi_k = \sum W_{|\mathbf{k}-\mathbf{p}|} n_p, \quad (3.24)$$

$$\Delta_k = -\frac{1}{2} \sum W_{|\mathbf{k}-\mathbf{p}|} \Delta_p B_p / E_p. \quad (3.25)$$

Hilfsgleichungen sind (3.9)-(3.12) mit $N_0 \equiv 0$.

3.3. Formale Unterschiede zwischen Paar- und Kondensat-Theorie

Das Quasiteilchenspektrum der Paar-Theorie mit $\text{BEC}(P_{\text{BEC}})$ ist lückenfrei, das der Kondensat-Theorie (C) nicht. Da die Lückenfreiheit unmittelbar mit dem Hugenholtz-Pines-Theorem²³⁾ für das chemische Potential μ zusammenhängt, stellen wir diese Größe in beiden Theorien gegenüber. Dazu schreiben wir (durch Herausziehen des $k=0$ -Terms aus ξ_0) Gl. (3.19) in der Form

$$\mu = NW_0 + \sum' W_k n_k + n_0 W_0 - |\Delta_0| \quad (P_{\text{BEC}}) \quad (3.26)$$

und übernehmen Gl. (3.13)

$$\mu = NW_0 + \sum W_k n_k - N_0 W_0 + \Delta_0. \quad (C) \quad (3.27)$$

Hätte Gl. (3.27) die Form

$$\mu = NW_0 + \sum W_k n_k + N_0 W_0 + \Delta_0, \quad (3.28)$$

so würde mit Gl. (3.12)

$$\tilde{\xi}_0 = -\Delta_0 \quad (3.29)$$

sofort ein lückenfreies Spektrum für die C-Theorie folgen (die numerischen Lösungen ergeben allgemein $\Delta_0 < 0$, so daß $\tilde{\epsilon}_0 > 0$ gewährleistet ist). Wenn wir die beiden "Kondensat"-Terme $N_0 W_0$ und $n_0 W_0$ miteinander identifizieren, so besteht der wesentliche Unterschied zwischen beiden chemischen Potentialen, daß in der C-Theorie ein Term $2 N_0 W_0$ im Vergleich zur P_{BEC} -Theorie fehlt. Dieser Unterschied rührt von der Tatsache her, daß der Erwartungswert

$$\frac{1}{2} W_0 \langle c_0^\dagger c_0^\dagger c_0 c_0 \rangle_t$$

in der P_{BEC} -Theorie mit

$$\frac{1}{2} W_0 (2 n_0^2 + |\chi_0|^2) = \frac{3}{2} n_0^2 W_0 \quad (3.30)$$

zu Buche schlägt, denn es ist $|\chi_0|^2 = n_0^2$ nach Gl. (3.18) und (3.17).

Hingegen liefert der entsprechende Ausdruck in der C-Theorie

$$\frac{1}{2} W_0 \langle \mathcal{J}^* \mathcal{J}^* \mathcal{J} \mathcal{J} \rangle_t = \frac{1}{2} N_0^2 W_0. \quad (3.31)$$

Das Hugenholtz-Pines-Theorem ist eine Aussage, die in jeder Ordnung einer Störungsentwicklung exakt gilt. Da das Bogolubov'sche Variationsverfahren jedoch eine echte Teilmenge von Diagrammen

einer diagrammatischen Störungsentwicklung bis zur "unendlichen" Ordnung aufsummiert ⁷⁾, sind die Voraussetzungen für die Gültigkeit des Theorems nicht notwendig erfüllt: z.B. fehlen alle Beiträge der 2.Ordnung, die sich aus zwei Termen $\sim \sqrt{N_0}$ des Hamiltonoperators, z.B.

$$\frac{1}{2} \sum W_q \sum^* c_{\vec{p}-\vec{q}}^+ c_{\vec{p}} c_{-\vec{q}}, \quad (3.32)$$

zusammensetzen (diese Terme verschwinden in der 1.Ordnung bei der Mittelung mit H_t).

3.4 Numerische Lösung

Unser Ziel ist es, die allgemeinen Eigenschaften der verschiedenen Lösungen des statistischen Variationsverfahrens zu studieren. Wir beabsichtigen nicht, das zu verwendende Pseudopotential zu optimieren, um eine möglichst gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten über ^4He zu erzielen. Stattdessen benutzen wir das einfachste nicht-triviale Modellpotential, das sowohl Kondensation im $\vec{k}=0$ -Zustand als auch die Bildung von Cooper-Paaren zuläßt und außerdem eine Faktorisierung der Integralkerne bewirkt. Letzteres erreicht man durch ein δ -Schalen-Potential der Form (s. Abb. 1)

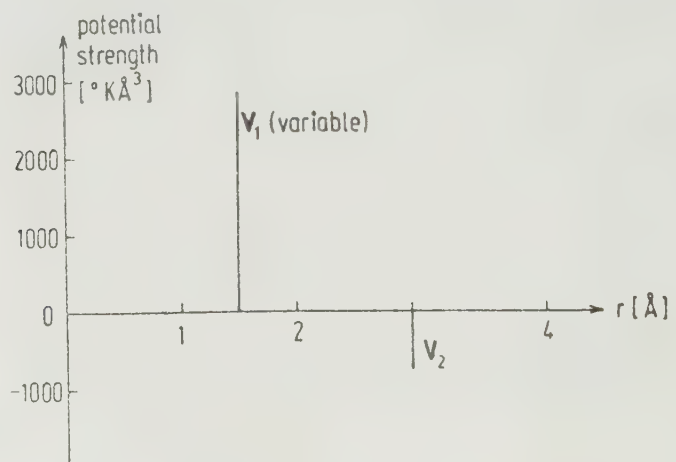
$$V(\vec{r}) = \sum_i V_i (4\pi r_i^2)^{-1} \delta(r - r_i) \quad (3.33)$$

Abb. 1

Pseudopotential-Approximation (2 Schalen)

$V_1 = \text{variabel}$

$V_2 = -750 \text{ K } \text{\AA}^3.$



Zur Berechnung der Lösungsparameter in den einzelnen Theorien beschränken wir uns auf zwei Schalen: eine Schale bei $r_1 = 1.5 \text{\AA}$ für den abstoßenden "core" des ^4He -Potentials und eine zweite

bei $r_2 = 3 \text{ \AA}$ für den anziehenden Anteil.

Zum Vergleich mit den Arbeiten von Evans und Mitarbeitern^{11),13)} variieren wir den abstoßenden Anteil. Obwohl unser Modellpotential sehr viel einfacher ist als das von diesen Autoren benutzte (bis zu 10 Schalen), finden wir gute Übereinstimmung in den numerischen Ergebnissen mit den zitierten Arbeiten. Daher scheint die detaillierte Form des Potentials zumindest für qualitative Ergebnisse unerheblich zu sein.

Die winkelmittelte Fouriertransformierte des isotropen Potentials Gl. (3.33) lautet dann

$$\overline{W}_{kp} \equiv \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_p W_{|\vec{r}-\vec{p}|} = \sum_i V_i j_0(kr_i) j_0(pr_i), \quad (3.34)$$

wobei $j_0(x) = \sin x/x$ die Bessel-Funktion 0.Ordnung ist. Indem wir die beiden k -abhängigen Lösungsparameter ξ_k und Δ_k nach diesen Funktionen entwickeln, z.B.

$$\Delta_k = \sum_{i=1}^2 \Delta_i j_0(kr_i), \quad (3.35)$$

und die Orthogonalitätsrelationen ausnutzen, können wir die Integralgleichungen in einen Satz von 5 nichtlinearen algebraischen Gleichungen entkoppeln; die zu bestimmenden Lösungsparameter sind dann $\xi_1, \xi_2, \Delta_1, \Delta_2$ sowie $c_0 = N_0/N$ (C-Theorie), $c_0 = n_0/N$ (P_{BEC}) oder μ (für P).

Etwa für die Kondensat-Theorie erhalten wir nach Gln.(3.6)-(3.8)

$$1 = c_0 + (\sum n_k)/N, \quad (3.36)$$

$$\Delta_i = N_0 V_i - (4\pi^2)^{-1} (V_i/r_i) \int_0^\infty p dp \sin(pr_i) \Delta_p B_p / E_p, \quad (3.37)$$

$$\xi_i = (4\pi^2)^{-1} (V_i/r_i) \int_0^\infty p dp \sin(pr_i) n_p, \quad (3.38)$$

$$\text{mit} \quad n_k = \frac{1}{2} (\tilde{\xi}_k B_k / E_k - 1) \quad (3.9)$$

und den jeweiligen Hilfsgleichungen. Hier sind wir schon zum thermodynamischen Limes ($N, V \rightarrow \infty, \rho = \text{const}$) übergegangen, d.h. wir haben ersetzt

$$\sum_{\vec{k}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k. \quad (3.39)$$

Für isotrope Integranden gilt $d^3k = 4\pi k^2 dk$. Die numerische Lösung kann dann mit Hilfe eines modifizierten Newton-Verfahrens zur Nullstellensuche ²²⁾ bewerkstelligt werden.

Als Daten für unsere "Modellsubstanz" ^4He haben wir überall benutzt:

$$\text{Dichte } \rho = 0.022 \text{ Atome}/\text{\AA}^3 = 0.146 \text{ g/cm}^3,$$

$$\text{Masse } m_{\text{He}} = 0.0824 \hbar^2/(\text{\AA}^2 k_B K) .$$

Alle Daten und Ergebnisse sind in den Einheiten $\text{\AA}$ (Länge), K (Energie; d.h. $k_B = 1$) und $\hbar$ (Drehimpuls) ausgedrückt. So entspricht z.B.:

$$\text{Druck} \quad 1 K/\text{\AA}^3 = 140.7 \text{ atm},$$

$$\text{Geschwindigkeit} \quad 1 K/\text{\AA}^{-1} = 13.09 \text{ m/s} .$$

Da die Kondensat-Theorie als Grenzfall das ideale Bose-Gas enthält ($V_1 = V_2 = 0$), kann man mit diesem Anfangswert beginnen und dann das Potential auf beliebige Werte "hochschalten". Für die P_{BEC} -Lösungsparameter kann man z.B. die schon berechneten C-Lösungen (bei gleichem Potential) als Anfangswerte nehmen.

Zur Berechnung der P-Lösungen kann man bei $T=0$ den abstoßenden Anteil des Potentials V_1 solange erhöhen, bis in den P_{BEC} -Lösungen der Wert $n_0 = 0$ erreicht wird, und dann diese Lösungen als Startwerte der P-Theorie benutzen (die Lösungsbereiche der P- und der P_{BEC} -Theorie überlappen sich bei $T=0$ geringfügig). In unseren Rechnungen halten wir den attraktiven Teil $V_2 = -750 K \text{\AA}^3$ (das entspricht ungefähr dem Minimum des Lennard-Jones-Potentials für ^4He) konstant und variieren den abstoßenden Teil V_1 zunächst bei $T=0$. Dann gehen wir (für ausgewählte Werte von V_1) zu endlichen Temperaturen über und berechnen die Temperatur T_λ , bis zu der kohärente Lösungen (mit $c_0 \neq 0$ oder $\Delta_k \neq 0$) existieren. Weiterhin berechnen wir die normale Phase (HF-Lösung), indem wir die Integralgleichung (3.25) für Δ_k in der P-Theorie streichen (d.h. $\Delta_k \equiv 0$ setzen). Die Ergebnisse für den Temperaturverlauf der Lösungsparameter und der dazugehörigen thermodynamischen Funktionen in den einzelnen Theorien werden im nächsten Kapitel diskutiert.

4. Zwischenbilanz

4.1. Diskussion der numerischen Lösungen

Für die Paar-Theorien (P und P_{BEC}) geben Evans und Harris¹³⁾ die in Abb. 2 schematisch dargestellten Existenzbereiche an; der attraktive Potentialanteil ist dabei konstant gehalten. Unsere Lösungen für diese Theorien sind für $V_2 = -750 \text{ K } \text{\AA}^3$ und $r_1 = 3 \text{ \AA}$ berechnet, was näherungsweise mit Lage und Stärke des Potentialminimums bei ^4He übereinstimmt.

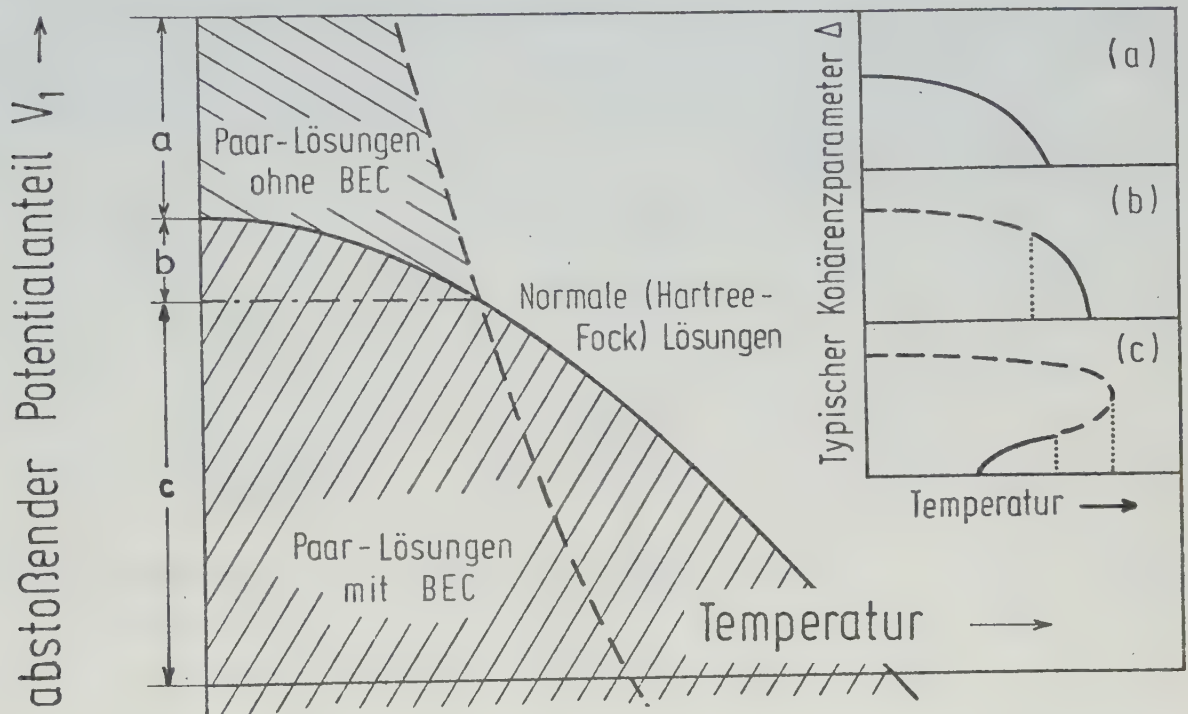


Abb. 2: Existenzbereiche von Paar-Lösungen in Abhängigkeit von der Temperatur und dem abstoßenden Potentialanteil (aus Lit. 13).

Wenn wir den abstoßenden Anteil V_1 vergrößern, finden wir zunächst bis $V_1 \approx 4000 \text{ K } \text{\AA}^3$ nur P_{BEC} -Lösungen (von unphysikalischen Zweigen sei zunächst abgesehen). Eine charakteristische Eigenschaft dieser Lösungen sind die lückenfreien und für kleine $|\vec{k}|$ linearen Quasiteilchenspektren (s. Abb. 3b). Der Übergang von der normalen flüssigen Phase in die kohärente Phase ist von 1. Ordnung, wie man aus den Unstetigkeiten der Entropie (Abb. 4) und der Kohärenzparameter Δ_1 und Δ_2 (Abb. 5a) erkennt (Δ_k ist der "Ordnungsparameter" der kohärenten Phase).

Abb. 3

Quasibosonenspektrum
 E_k bei $T = 0.2 \text{ K}$ und
 $V_2 = -750 \text{ K } \text{\AA}^3$:

(a) P-Theorie bei
 $V_1 = 6000 \text{ K } \text{\AA}^3$,

(b) P_{BEC} -Theorie bei
 $V_1 = 4500 \text{ K } \text{\AA}^3$.

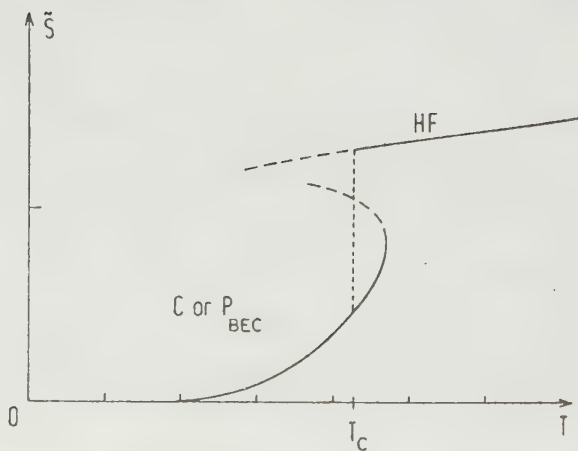
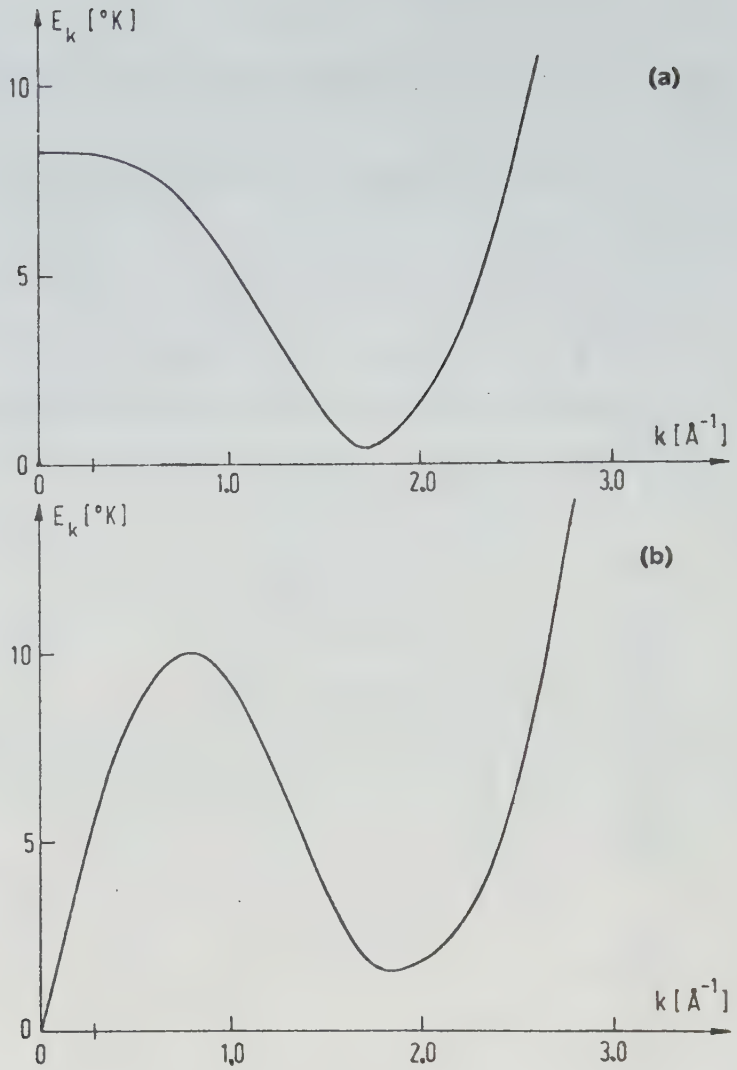
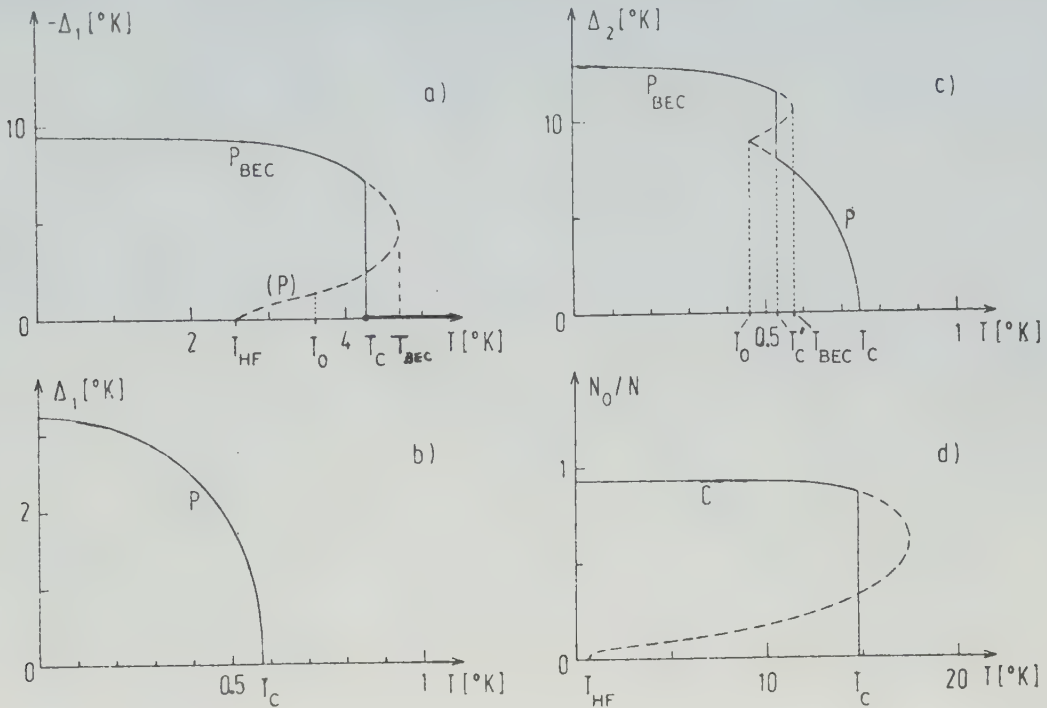


Abb. 4

Entropie $\tilde{S}$ als Funktion
der Temperatur T für
die C- und die P_{BEC} -
Theorie (schematisch).

Abb. 5: Temperaturabhängigkeit des Ordnungsparameters in den verschiedenen Theorien. a) P_{BEC} mit $V_1 = 1500 \text{ K } \text{\AA}^3$, b) P mit $V_1 = 6000 \text{ K } \text{\AA}^3$, c) P_{BEC} und P bei $V_1 = 4500 \text{ K } \text{\AA}^3$, d) C bei $V_1 = 4500 \text{ K } \text{\AA}^3$. T_c , T'_c sind die kritischen Temperaturen des Phasenübergangs; für $T < T_{\text{BEC}}$ existiert BEC; bei T_0 wird $E_k = 0$ für $k \rightarrow 0$; unterhalb T_{HF} existieren keine HF-Lösungen mehr.



In der Nachbarschaft einer kritischen Temperatur T_c finden wir 3 Lösungen (vgl. Abb. 5a): neben der verschwindenden Lösung für den Normalzustand (HF) existiert ein instabiler Zweig, der für $T_{\text{HF}} \leq T \leq T_0$ einer kondensatfreien Paar-Lösung (P) entspricht und für $T > T_0$ zu einer Lösung mit endlichem Kondensat (P_{BEC}) gehört. Der obere Zweig stellt unterhalb T_c die (im Rahmen der P_{BEC} -Theorie) Phase mit der kleinsten freien Energie dar; bei der "Sprungtemperatur" T_c wird die freie Energie der HF-Lösung größer als die entsprechende freie Energie der P_{BEC} -Lösung des oberen Zweiges.

Im Gegensatz zu P_{BEC} existieren die P-Lösungen (ohne Kondensat) oberhalb von $V_1 \approx 4800 \text{ K } \text{\AA}^3$ bis zu $T=0$ und zeigen eine endliche "Lücke" im Quasiteilchenspektrum E_k (s. Abb. 3a).

Der Phasenübergang ist von 2. Ordnung, die Übergangstemperatur T_C fällt mit der maximalen Temperatur zusammen, bis zu der kohärente Lösungen existieren (vgl. Abb. 5b).

In Abb. 6 sind die "Energielücke" $E_{k \rightarrow 0}$ sowie Entropie $\tilde{S}$ und die spezifische Wärme $\tilde{c}_V$ für die P-Theorie dargestellt ($\tilde{c}_V$ ist bei T_C nach Gl. (2.34) stetig, weil E_k diese Eigenschaft besitzt).

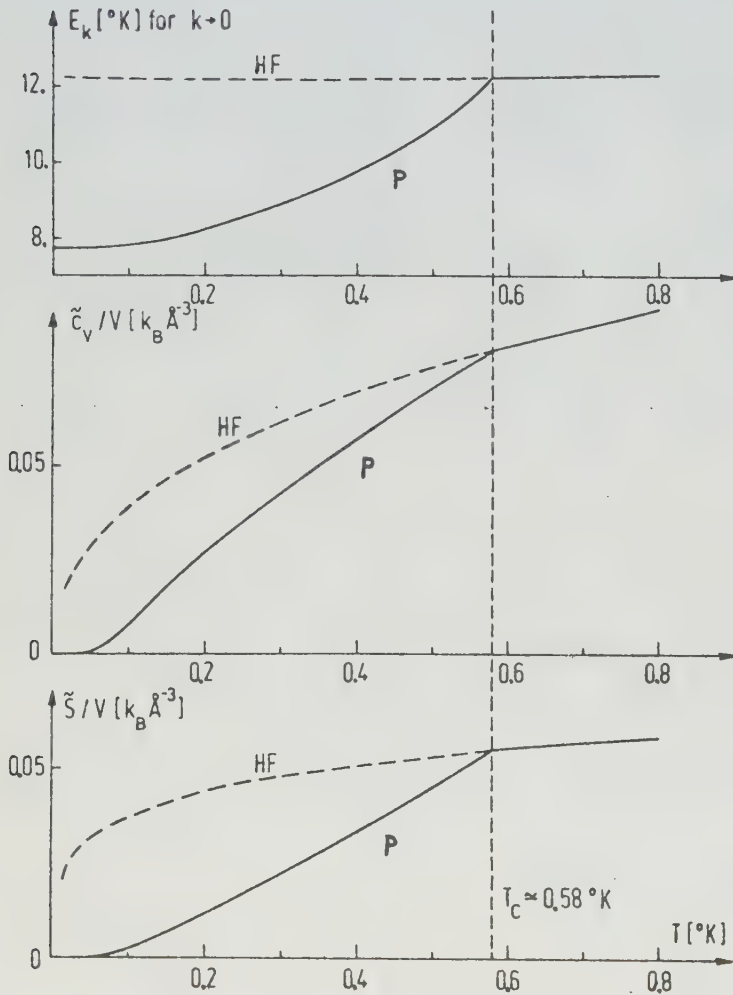


Abb. 6

Einige Eigenschaften
der kondensatfreien
Paar-Theorie (P) mit
 $V_1 = 6000 \text{ K Å}^3$.

Innerhalb eines Zwischenbereichs (vgl. Abb. 2) des abstoßenden Potentialteils von $4000 < V_1 < 4800 \text{ K Å}^3$ existieren sowohl P- als auch P_{BEC} -Lösungen. Hier gehen die P-Lösungen nur bis $T_0 > 0$. Daher gibt es neben dem Phasenübergang 2. Ordnung bei T_C noch einen Phasenübergang 1. Ordnung bei T'_C in die energetisch günstigere P_{BEC} -Phase.

Aus Abb.5c erkennt man, daß T'_C zwischen den beiden Temperaturen T_0 und T_{BEC} liegt. Unterhalb T_{BEC} treten P_{BEC} -Lösungen auf, bei T_0 verschwindet die "Lücke" $E_{k \rightarrow 0}$ in der P-Theorie.

Während für bestimmte Werte des abstoßenden Potentialteils V_1 nur Lösungen für die eine oder andere Paar-Theorie bei $T = 0$ existieren, können Lösungen für die Kondensat-Theorie (C) für alle Werte von V_1 gefunden werden (falls V_1 zu klein ist, wird das System aber mechanisch instabil, d.h. Druck $p < 0$!). Die Quasiteilchenspektren der C-Theorie weisen eine "Lücke" auf, s. Abb.7.

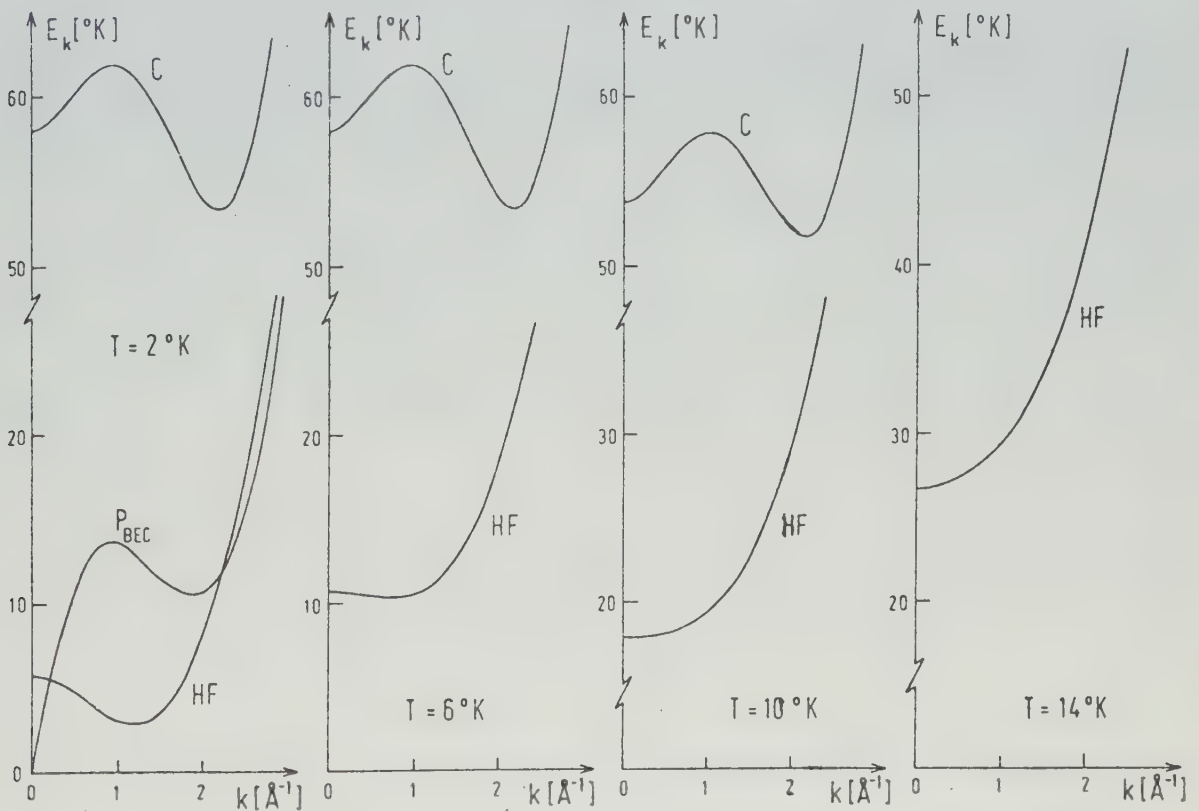


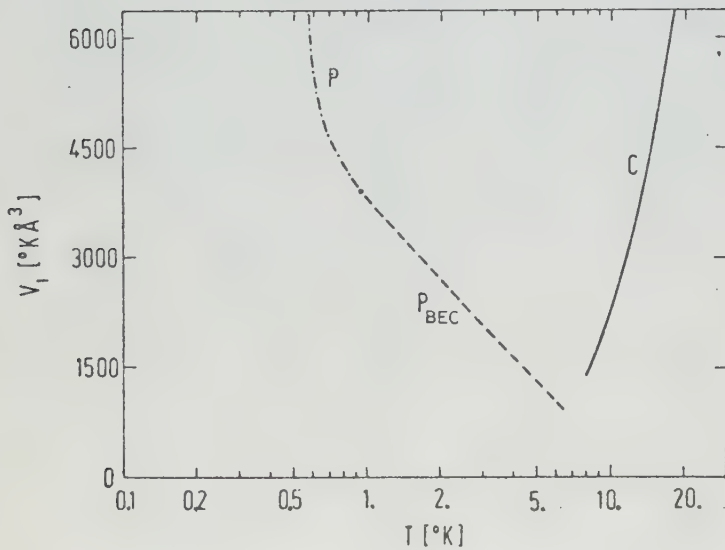
Abb. 7: Quasibosonenspektren der P_{BEC} -, C- und der HF-Theorie bei $V_1 = 2500 \text{ K } \text{\AA}^3$ und verschiedenen Temperaturen T . Die Übergangstemperaturen sind $T_C = 9.95 \text{ K}$ (HF - C) und $T_C = 2.6 \text{ K}$ (Übergang HF - P_{BEC}).

Genau wie die P_{BEC} -Lösungen zeigen die C-Lösungen einen unstetigen Phasenübergang in die normale Phase. Der Ordnungsparameter der C-Theorie ist $c_0 = N_0/N$, seinen Temperaturverlauf entnimmt man Abb.5d. In der Nähe von T_C existieren wieder drei Lösungen: neben der HF-Lösung $N_0 = 0$ gibt es einen instabilen unteren sowie einen oberen Zweig; letzterer ist stabil für $T \leq T_C$. Abb.5d zeigt auch, daß

der Kondensatanteil $c_0 \approx 93\%$ (für die angegebenen Potentialparameter) ist.

Ein Vergleich der Quasiteilchenspektren für die verschiedenen Theorien ist in Abb.7 durchgeführt (für dieses Potential existieren keine stabilen P-Lösungen; diese ähneln jedoch dort, wo sie existieren, den hier dargestellten C-Spektren). Weiterhin zeigt diese Abbildung, daß der Übergang von der normalen Phase in die C-Phase bei höheren Temperaturen T_C erfolgt als der Übergang in die P_{BEC} -Phase. Die Übergangstemperaturen T_C sind als Funktion des abstoßenden Potentialteils V_1 in Abb.8 dargestellt.

Abb. 8



Übergangstemperaturen T_C der P-, P_{BEC} - und C-Theorie. In P_{BEC} und C ist T_C durch den Schnittpunkt der freien Energien der kondensierten Phase und der HF-Phase gegeben.

Daraus geht hervor, daß die Kondensat-Theorie (für alle untersuchten Potentiale, die zu mechanisch stabilen Lösungen führen) stets die höhere Übergangstemperatur aufweist.

Bisher haben wir Stabilitätsbetrachtungen nur innerhalb der einzelnen Theorien durchgeführt, um unphysikalische Zweige von Lösungen zu charakterisieren. Wenn wir nun die freien Energien vergleichen, die zu den Lösungen der einzelnen Theorien für feste Temperatur T und vorgegebene Dichte ρ gehören, stellen wir fest, daß - für alle untersuchten Potentiale - die C-Lösungen die niedrigsten freien Energien liefern. Daher müssen wir schließen, daß im Rahmen der durchgeführten verallgemeinerten HF-Approximation die C-Theorie die physikalisch stabile Phase bei tiefen Temperaturen beschreibt.

In Abb.9 sind die freien Energien (pro Volumeneinheit) als Funktion von V_1 für die beiden Paar-Theorien und die Kondensat-Theorie dargestellt. Ähnliche Ergebnisse erhält man für endliche Temperaturen.

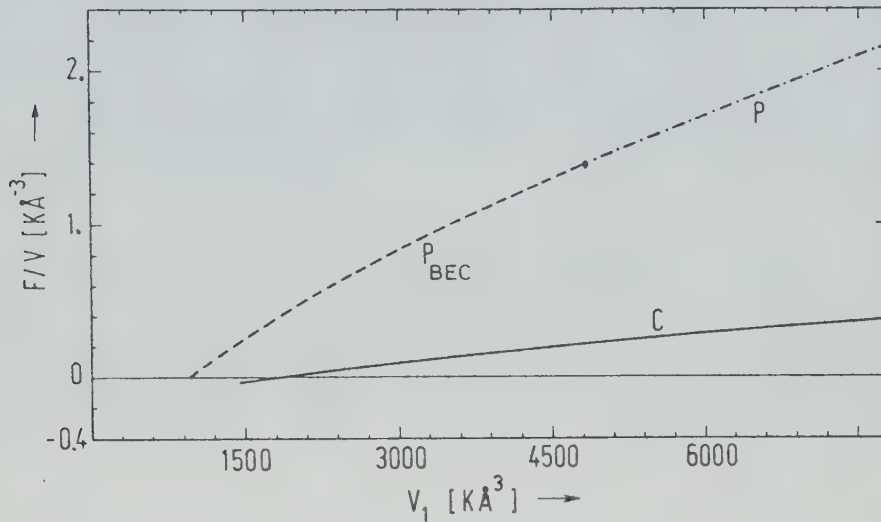


Abb. 9: Vergleich der freien Energien pro Volumen der Kondensat-Theorie (C) und der beiden Paar-Theorien (P_{BEC} , P) bei $T=0$ und festem $V_2=-750 \text{ K}\text{\AA}^3$.

4.2. Kritik und Überleitung

Das statistische Variationsprinzip gestattete uns die einheitliche Ableitung verschiedener Theorien zur Beschreibung der kohärenten Phase eines Bosonensystems. Die durch diese Methode gegebene verallgemeinerte HF-Theorie lieferte selbstkonsistente Ergebnisse für die Einteilchengrößen des Systems und gleichzeitig eine definite obere Schranke für das thermodynamische Potential bzw. die freie Energie. Aus den numerischen Ergebnissen resultiert folgendes qualitative Bild:

- es erscheint zumindest unwahrscheinlich, durch ein verbessertes realistisches Modellpotential Lösungen für die Paartheorien zu finden, die energetisch günstiger liegen als die entsprechenden Lösungen der Kondensat-Theorie (angesichts des relativ großen Abstandes der freien Energien und ihrer schwachen Variation auch bei Veränderung des attraktiven Potentialteils; vgl. Abb.9);
- daher kommt die kondensatfreie Paar-Theorie (P) nicht in Betracht, obwohl sie sich durch die richtige Ordnung des Phasengangs auszeichnet;
- trotz ihres lückenfreien, für kleine $|\vec{k}|$ linearen Quasiteilchenspektrums kommt die P_{BEC} -Theorie nicht in Betracht.

An der durch das Minimum der freien Energie favorisierten Kondensat-Theorie muten folgende qualitativen und quantitativen Ergebnisse recht unphysikalisch an:

- der Phasenübergang ist von 1.Ordnung;
- es tritt eine Lücke im Quasiteilchenspektrum auf zwischen der Energie $E_0 = 0$ des (ruhenden) Kondensats und dem Minimum der Quasiteilchenenergie $E_{k \rightarrow 0}$;
- das Quasiteilchenspektrum ist quadratisch für kleine k ;
- der Ordnungsparameter der kondensierten Phase, der Kondensatanteil N_0/N , ist sehr groß (ca. 90 %). Er läßt sich durch Variation der Potentialparameter im mechanisch stabilen

Bereich des Systems nur um einige Prozent verändern. Neutronenstreuexperimente deuten auf etwa 10 % hin, wenn auch die Deutung dieser Experimente recht umstritten ist;

- Entropie und spezifische Wärme sind zwar nichtnegative, streng monoton wachsende Funktionen der Temperatur, ihr quantitativer Verlauf weist darüber hinaus jedoch nur geringe Ähnlichkeit mit den experimentellen Befunden auf (stetige Entropie, λ -Form der spezifischen Wärme).

Man kann nicht erwarten, daß durch eine thermodynamisch konsistente Approximation, die ein Einteilchenbild einführt, auch die dynamischen Eigenschaften eines Systems optimal genähert werden, d.h. das Quasiteilchenspektrum darf im allgemeinen nicht mit dem Anregungsspektrum des Systems identifiziert werden, das aus einer geeigneten Approximation für eine Zweiteilchen-Funktion abgeleitet werden muß. Solche Funktionen sind z.B. die retardierten Korrelationsfunktionen, die die Antwort des Systems mit der vorangegangenen Störung des Gleichgewichts verknüpfen, wie sie z.B. durch Einschießen eines Neutrons oder Einstrahlen einer Schallwelle in ^4He experimentell gegeben ist.

Wir werden in den folgenden Kapiteln mit Hilfe der Theorie der linearen Antwort die retardierte Dichte-Korrelationsfunktion in einer Random-Phase-Approximation (RPA) berechnen und daraus das Anregungsspektrum erhalten.

Eine andere Methode, die dynamischen Eigenschaften zu untersuchen, ist die Berechnung der zeitlichen Änderung einer "Dichtefluktuation" $\rho_{\vec{q}}^+ = \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}+\vec{q}}^+ c_{\vec{k}}$ mit Hilfe der Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt} c_{\vec{k}+\vec{q}}^+ c_{\vec{k}} = \frac{i}{\hbar} [H, c_{\vec{k}+\vec{q}}^+ c_{\vec{k}}] \quad (4.1)$$

und der Durchführung einer RPA, wie sie etwa vom freien Elektronengas her bekannt ist. Dort erhält man (Ziman ²⁵⁾, S. 159)

$$[H, c_{\vec{n}}^+ c_{\vec{r}}] = (\epsilon_n - \epsilon_r) c_{\vec{n}}^+ c_{\vec{r}} + \sum_{\vec{k}} W_{\vec{k}} [c_{\vec{n}-\vec{k}}^+ c_{\vec{r}} s_{\vec{k}}^+ - s_{\vec{k}}^+ c_{\vec{n}}^+ c_{\vec{r}+\vec{k}}] \quad (4.2)$$

und faktorisiert dann die Produkte aus vier Teilchenoperatoren durch Vernachlässigung von Fluktuationen um die mittlere Besetzungszahl, d.h.

$$\begin{aligned} c_{\vec{n}-\vec{k}}^+ c_{\vec{k}} &= \langle c_{\vec{n}-\vec{k}}^+ c_{\vec{k}} \rangle \delta_{\vec{k}, \vec{n}-\vec{k}} + [c_{\dots}^+ c_{\dots} - \langle c_{\dots}^+ c_{\dots} \rangle] \\ &\simeq \langle c_{\vec{k}}^+ c_{\vec{k}} \rangle \delta_{\vec{k}, \vec{n}-\vec{k}}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Diese RPA (Mitnahme nur der Terme mit $\vec{k} = \vec{n} - \vec{k}$) läßt sich in unserem Falle nur unter sehr großem Aufwand durchführen, da wir natürlich über die schon gemachte HF-Approximation hinausgehen wollen und daher die Quasiteilchenenergien E_k durch zusätzliche Summationen und Faktorisierungen (z.B. ist $\langle c c \rangle_t \neq 0$!) der 4-Teilchenoperator-Terme reproduzieren müssen. Diese "RPA für Quasiteilchen" läßt sich aber wesentlich einfacher mit Hilfe der Dichte-Korrelationsfunktion durchführen.

In den Kapiteln 5 bis 8 stellen wir als erstes das allgemeine Verfahren der linearen Antwort auf eine äußere Störung für endliche Temperaturen dar und beschränken uns dann auf eine dichteabhängige Störung, auf die das System mit einer Dichteänderung reagiert. Ursache und Reaktion werden dabei durch die retardierte Dichte-Korrelationsfunktion verknüpft. In Kapitel 6 sind zunächst einige allgemeine Eigenschaften dieser wichtigen Zweiteilchenfunktion und Beziehungen zu anderen Vielteilchenfunktionen angegeben. In Kapitel 7 führen wir die eigentliche Berechnung der Dichte-Korrelationsfunktion in Random-Phase-Approximation durch; dieses Verfahren liefert die Dispersionsrelation für die Anregungen des Systems. Hieraus leiten wir in Kapitel 8 das Spektrum der energetisch niedrigsten Anregungen im Grenzfall verschwindender Dämpfung ab.

Die charakteristische Größe für ein supraflüssiges System ist die suprafluide Dichte, die man am einfachsten im Rahmen eines Zwei-Flüssigkeits-Modells verstehen kann. Grundzüge dieses Modells und Gemeinsamkeiten zwischen supraflüssigen Bose- und supraleitenden Fermisystemen besprechen wir in Kapitel 9. In Kapitel 10 berechnen wir die (transversale Komponente der) retardierte(n) Strom-Korrelationsfunktion. Diese Funktion verknüpft ein äußeres Wirbelfeld, das an die Stromdichte ankoppelt, mit der Reaktion der Stromdichte auf diese Störung. Außerdem gestattet diese Funktion die Berechnung

der suprafluiden Dichte.

Wir werden uns bei den folgenden Rechnungen immer auf Ergebnisse für die Kondensat-Theorie (C) beschränken; eine Erweiterung auf die beiden Paar-Theorien (P und P_{BEC}) ist nach dem in Abschnitt 3.2 durchgeführten Verfahren (Sonderbehandlung für die Terme mit $\vec{k} = 0$ sowie $N_0 \equiv 0$) trivial.

5. Lineare Antwort auf eine äußere Störung

5.1. Allgemeine Theorie der linearen Antwort für $T \neq 0$

Zur Zeit $t = -\infty$ befinde sich das System, dessen Eigenschaften untersucht werden sollen, im thermischen Gleichgewicht. Alle Meßgrößen lassen sich aus den Erwartungswerten der zugeordneten Operatoren $\hat{O}$ berechnen ($\text{tr} = \text{Spur}$):

$$\langle \hat{O} \rangle_0 = \text{tr}(\rho_0 \hat{O}) , \quad (5.1)$$

wobei
$$\rho_0 = \exp(-\beta H_0) / \text{tr} \exp(-\beta H_0) \quad (5.2)$$

der statistische Operator bzgl. des zeitunabhängigen großkanonischen Hamilton-Operators H_0 ist, der das ungestörte wechselwirkende Vielteilchensystem beschreibt.

Das gestörte System wird dann durch

$$H(t) = H_0 + \exp(\epsilon t) H_S(t) \equiv H_0 + H_1(t) \quad (5.3)$$

beschrieben; $\epsilon = 0^+$ erzwingt das Verschwinden der Störung bei $t = -\infty$.

Die zeitabhängigen Erwartungswerte der Observablen berechnen sich etwa im Schrödingerbild nach der Formel

$$\langle \hat{O}(t) \rangle = \text{tr}(\rho(t) \hat{O}) . \quad (5.4)$$

Hier nun ist $\rho(t)$ der statistische Operator bzgl. $H(t)$. Seine zeitliche Entwicklung läßt sich mit Hilfe der Liouville-Gleichung beschreiben (die sich von der Heisenberg-Gleichung, welche die Bewegung von dynamischen Variablen beschreibt, nur durch ein Vorzeichen unterscheidet!)

$$\dot{\rho}(t) = (-i/\hbar)[H(t), \rho(t)] . \quad (5.5)$$

Wir führen die Abweichung $\delta\rho(t)$ des statistischen Operators von seinem Gleichgewichtswert ein

$$\delta\rho(t) = \rho(t) - \rho_0 \quad (5.6)$$

und gehen in die Wechselwirkungsdarstellung bzgl. des gestörten Systems (die der Heisenberg-Darstellung des ungestörten Systems entspricht); es gilt dann die Transformation

$$\delta\rho_I(t) = \exp(i H_0 t/\hbar) \delta\rho(t) \exp(-i H_0 t/\hbar) . \quad (5.7)$$

Nun ist

$$i \hbar \dot{\rho} = i \hbar \dot{\rho}_I = \left\{ [H_0, \rho_0] + [H_0, \delta\rho] + [H_1, \rho_0] + [H_1, \delta\rho] \right\}.$$

Der erste Kommutator verschwindet, der letzte ist bereits von 2. Ordnung in der Störung ($\delta\rho \sim H_1$ angenommen) und damit vernachlässigbar in der linearen Näherung.

Andererseits ist

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_I &= \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \exp(-i H_0 t/\hbar) \rho_I(t) \exp(i H_0 t/\hbar) \right\} \\ &= (-i/\hbar) [H_0, \delta\rho] + \exp(-i H_0 t/\hbar) \dot{\rho}_I(t) \exp(i H_0 t/\hbar), \end{aligned}$$

so daß im WW-Bild übrig bleibt

$$\dot{\rho}_I(t) = (-i/\hbar) [H_1^I(t), \rho_0] \quad (5.8)$$

Durch Integration von $t' = -\infty$ bis t und Addition von

$$\rho_0^I = \rho_0$$

erhalten wir $\rho_I(t) = \rho_0 - (i/\hbar) \int_{-\infty}^t dt' [H_1^I(t'), \rho_0]$ (5.9)

mit $H_1^I(t) = \exp(i H_0 t/\hbar) H_1(t) \exp(-i H_0 t/\hbar).$ (5.10)

Für den Erwartungswert von $\hat{O}(t)$ folgt dann durch zweimaliges Einschieben von $1 = \exp(-i H_0 t/\hbar) \exp(i H_0 t/\hbar)$ und zyklisches Vertauschen unter der Spur

$$\begin{aligned} \langle \hat{O}(t) \rangle &= \text{tr} \left\{ \rho(t) \hat{O} \right\} = \text{tr} \left\{ \rho_I(t) \hat{O}_I(t) \right\} \\ &= \text{tr} \left\{ \rho_0 \hat{O}_I(t) \right\} - (i/\hbar) \int_{-\infty}^t dt' \text{tr} \left\{ [H_1^I(t'), \rho_0] \hat{O}_I(t) \right\} \\ &= \langle \hat{O}_I(t) \rangle_0 - (i/\hbar) \int_{-\infty}^t dt' \langle [\hat{O}_I(t), H_1^I(t')] \rangle_0 \end{aligned} \quad (5.11)$$

Die Änderung des Erwartungswertes ist damit gegeben durch

$$\begin{aligned} \delta \langle \hat{O}(t) \rangle &\equiv \langle \hat{O}(t) \rangle - \langle \hat{O}_I(t) \rangle_0 \\ &= - (i/\hbar) \int_{-\infty}^t dt' \langle [\hat{O}_I(t), H_1^I(t')] \rangle_0. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Die lineare "Antwort" einer Observablen auf eine Störung läßt sich also auf die Berechnung des Erwartungswertes eines Kommutators bzgl. des ungestörten Systems zurückführen.

5.2. Ankopplung der Störung an die Teilchendichte $n(\vec{r})$

Diese Art der Kopplung (z.B. Schallwelle, Einschub eines schwach wechselwirkenden Probeteilchens) wird durch folgenden Stör-Hamilton-Operator beschrieben

$$H_S(t) = \int d^3r U(\vec{r}t)n(\vec{r}) . \quad (5.13)$$

Dabei steht $n(\vec{r}) = \psi^\dagger(\vec{r})\psi(\vec{r})$ für den Operator der Teilchenzahldichte (vom Spin sei hier abgesehen) und $U(\vec{r}t)$ für das skalare Kopplungspotential. Wenn das ungestörte System räumlich translationsinvariant (homogen) ist, was wir für das Modell-Bosonensystem voraussetzen wollen, rechnet man besser mit den Fourier-Entwicklungen

$$U(\vec{r}t) = V^{-1} \sum \tilde{U}_{\vec{k}}(t) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \equiv \sum U_{\vec{k}}(t) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (5.14a)$$

$$n(\vec{r}) = V^{-1} \sum n_{\vec{k}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (5.14b)$$

$$\psi^\dagger(\vec{r}) = V^{-\frac{1}{2}} \sum c_{\vec{k}}^\dagger \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}) . \quad (5.14c)$$

Damit wird

$$\begin{aligned} H_S(t) &= V^{-2} \sum \int d^3r U_{\vec{q}}(t) n_{\vec{k}} \exp(i(\vec{q}+\vec{k}) \cdot \vec{r}) \\ &= \sum U_{\vec{q}}(t) n_{-\vec{q}} \\ &= \sum U_{\vec{q}}(t) c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}-\vec{q}} , \end{aligned} \quad (5.15)$$

wobei wir von den Beziehungen

$$\int d^3r \exp(i(\vec{q}+\vec{k}) \cdot \vec{r}) = V \delta_{-\vec{q}, \vec{k}} \quad (5.16a)$$

$$n_{\vec{q}} = \sum c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}+\vec{q}} = \sum c_{\vec{k}-\vec{q}}^\dagger c_{\vec{k}} \quad (5.16b)$$

Gebrauch gemacht haben.

5.3. Reaktion der Dichte auf eine dichteabhängige Störung

Wir untersuchen nun die zeitabhängige Änderung der Teilchendichte durch eine Störung, die an die Dichte ankoppelt (Glg. [5.13]). Es ist also $\hat{O}(t) = n(\vec{r}t)$ und somit

$$\delta \langle n(\vec{r}t) \rangle = (-i/\hbar) \int_{-\infty}^t dt' \int d^3r' U(\vec{r}'t') \langle [n(\vec{r}t), n(\vec{r}'t')] \rangle_0 e^{et'} \quad (5.17)$$

Mit der Definition

$$i D^R(\vec{r}t, \vec{r}'t') = \langle [n(\vec{r}t), n(\vec{r}'t')] \rangle_0 \theta(t-t') e^{\epsilon t'} \quad (5.18)$$

kann die obere Integrationsgrenze auf $+\infty$ verschoben werden; es tragen weiterhin nur Zeiten $t' \leq t$ bei, dh. die Reaktion des Systems ist kausal. Die Funktion D^R wird als retardierte Dichte-Korrelationsfunktion oder auch als retardierter Dichte-Dichte-Kommutator bezeichnet (die Teilchendichte-Operatoren sind im Heisenbergbild bzgl. des ungestörten Systems). Mit der Kenntnis dieser Funktion ist auch die lineare kausale Antwort bekannt:

$$\delta \langle n(\vec{r}t) \rangle = \hbar^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int d^3r' U(\vec{r}'t') D^R(\vec{r}t, \vec{r}'t') \quad (5.19)$$

Da das ungestörte System räumlich homogen und zeitlich translationsinvariant ist, geht mit

$$D^R(\vec{r}t, \vec{r}'t') = D^R(\vec{r}-\vec{r}', t-t') \quad (5.20)$$

das doppelte Faltungsintegral in Glg. [5.19] nach Fouriertransformation über in das Produkt der Fourierkoeffizienten

$$\delta \langle n_{\vec{k}}(\omega) \rangle = \hbar^{-1} U_{\vec{k}}(\omega) D^R(\vec{k}\omega) \quad (5.21)$$

5.4. Formale Berechnung der Dichte-Korrelationsfunktion

Ist das ungestörte System räumlich translationsinvariant, dann kann die retardierte Dichte-Korrelationsfunktion

$$i D^R(\vec{r}t, \vec{r}'t') = V^{-2} \sum_{\vec{k}, \vec{p}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r} + i\vec{p} \cdot \vec{r}') \langle [n_{\vec{k}}^{\rightarrow}(t), n_{\vec{p}}^{\rightarrow}(t')] \rangle_0 \times \theta(t-t') e^{\epsilon t'}$$

nur eine Funktion von $\vec{r} - \vec{r}'$ sein, und es ergibt sich die Vereinfachung

$$\langle [n_{\vec{k}}^{\rightarrow}(t), n_{\vec{p}}^{\rightarrow}(t')] \rangle_0 = \langle [n_{\vec{k}}^{\rightarrow}(t), n_{-\vec{k}}^{\rightarrow}(t')] \rangle_0 \delta_{-\vec{k}, \vec{p}} \quad (5.22)$$

Dies kann man unmittelbar durch Fourier-(Rück-) Transformation des Kommutators sehen, denn dabei erhält man zwei unabhängige

Integrationen im Ortsraum, die sich für translationsinvariante Systeme in eine Integration über $\vec{r}$ und eine zweite über die Relativkoordinate $\vec{r} - \vec{r}'$ umwandeln lassen (Zeitargumente sind im folgenden unterdrückt):

$$\begin{aligned} \langle [n_{\vec{k}}, n_{\vec{p}}] \rangle_0 &= \int d^3r \int d^3r' \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\vec{p} \cdot \vec{r}') \langle [n(\vec{r}), n(\vec{r}')] \rangle_0 \\ &= \int d^3(r-r') \int d^3r' \exp(-i\vec{k} \cdot (\vec{r}-\vec{r}') - i(\vec{k}+\vec{p}) \cdot \vec{r}') \times \\ &\quad \times \langle [n(\vec{r}-\vec{r}'), n(0)] \rangle_0 \\ &= \int d^3(r-r') \exp(-i\vec{k} \cdot (\vec{r}-\vec{r}')) \langle [n(\vec{r}-\vec{r}'), n(0)] \rangle_0 \times \\ &\quad \times V \delta_{-\vec{k}, \vec{p}} . \end{aligned}$$

Wenn auch noch die zeitliche Translationsinvarianz berücksichtigt wird, folgt mit $\tau = t-t'$

$$i D^R(\vec{k}, \tau) = \langle [n_{\vec{k}}(\tau), n_{-\vec{k}}(0)] \rangle_0 \theta(\tau) e^{-\epsilon \tau} \quad (5.23)$$

bzw. für die zeitliche Fouriertransformierte

$$i D^R(\vec{k}, \omega) = \int_0^\infty d\tau \exp(i\omega\tau) \langle [n_{\vec{k}}(\tau), n_{-\vec{k}}(0)] \rangle_0 e^{-\epsilon \tau} . \quad (5.24)$$

Wir werden bei unserer Approximation von Gl.[5.24] ausgehen.

6. Beziehungen von $D^R(\vec{k}, \omega)$ zu anderen Vielteilchenfunktionen

In diesem Kapitel sollen einige Beziehungen zwischen den retardierten, avancierten und zeitgeordneten Korrelationsfunktionen hergestellt werden sowie auf Beziehungen zum dynamischen Strukturfaktor, zur verallgemeinerten dynamischen Suszeptibilität und zur Polarisationsfunktion hingewiesen werden.

6.1. Dichte-Korrelationsfunktionen

Die erste Aufgabe läßt sich am einfachsten durch Gegenüberstellung der analytischen Eigenschaften der einzelnen Funktionen lösen. Dazu bilden wir die thermischen Erwartungswerte mit den Eigenzuständen $|n\rangle$ des exakten ungestörten Hamiltonoperators

$$H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (6.1)$$

$$\text{und } \langle \dots \rangle_0 = Z^{-1} \sum_n \exp(-\beta E_n) \langle n | \dots | n \rangle \quad (6.2)$$

$$\text{mit } Z = \text{tr} \exp(-\beta H_0) .$$

Für alle folgenden Überlegungen wählen wir ein Maßsystem mit $\hbar$ als Einheit ($\hbar = 1$).

Beginnen wir mit dem nichtretardierten Kommutator

$$\begin{aligned} i D(\vec{k}, \omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle [n_{\vec{k}}(t), n_{-\vec{k}}(0)] \rangle_0 \\ &= \int dt e^{i\omega t} Z^{-1} \sum_{m,n} \left\{ e^{-\beta E_m} \langle m | n_{\vec{k}}(t) | n \rangle \langle n | n_{-\vec{k}} | m \rangle \right. \\ &\quad \left. - e^{-\beta E_n} \langle n | n_{-\vec{k}} | m \rangle \langle m | n_{\vec{k}}(t) | n \rangle \right\} . \end{aligned} \quad (6.3)$$

$$\text{Wegen Glg. (5.16b) gilt } n_{-\vec{k}} = n_{\vec{k}}^+ . \quad (6.4)$$

Die Zeitabhängigkeit von $n_{\vec{k}}^+(t)$ läßt sich mit Glg (6.1) sofort angeben

$$i D(\vec{k}, \omega) = Z^{-1} \sum_{m,n} \int dt e^{i(\omega + E_m - E_n)t} (e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}) |\langle m | n_{\vec{k}} | n \rangle|^2 \quad (6.5)$$

Die Zeitintegration liefert

$$i D(\vec{k}, \omega) = 2\pi Z^{-1} \sum_{m,n} \delta(\omega + E_m - E_n) (e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}) M_{\vec{k}}^+ \quad (6.6)$$

mit der Abkürzung $M_k^\pm = |\langle m | n_k^\pm | n \rangle|^2$. (6.7)

Entsprechend erhält man für die retardierte (Faktor $\theta(t)$) bzw. die avancierte (Faktor $\theta(-t)$) Dichtekorrelationsfunktion nach der Zeitintegration

$$D^R(\vec{k}, \omega) = Z^{-1} \sum_{m,n} \frac{1}{\omega + K_m - K_n + i\epsilon} (e^{-\beta K_m} - e^{-\beta K_n}) M_k^\pm, \quad (6.8a)$$

$$D^A(\vec{k}, \omega) = Z^{-1} \sum_{m,n} \frac{1}{\omega + K_m - K_n - i\epsilon} (e^{-\beta K_m} - e^{-\beta K_n}) M_k^\pm. \quad (6.8b)$$

Für die Durchführung der Zeitintegration sind Konvergenzfaktoren $\exp(-\epsilon t)$ für die retardierte bzw. $\exp(\epsilon t)$ für die avancierte Funktion im Integranden erforderlich, sofern nicht schon $\text{Im } \omega > 0$ ($\text{Im } \omega < 0$) für die retardierte (avancierte) Funktion gilt.

Die Pole der kausalen retardierten Funktion liegen in der unteren, die der avancierten Funktion in der oberen Halbebene. In den entgegengesetzten Halbebenen sind diese Funktionen daher analytisch. Die Pole definieren die möglichen Übergänge zwischen Zuständen, die durch den Dichte-Operator verknüpft sind, und damit die möglichen Anregungen des Systems.

Der Vollständigkeit halber geben wir noch die zeitgeordnete Dichte-Korrelationsfunktion an

$$\begin{aligned} i D(\vec{k}, \omega) &= \int dt e^{i\omega t} \langle T(n_{\vec{k}}(t) n_{-\vec{k}}(0)) \rangle \\ &= \left\{ \begin{array}{l} \text{1. Teil des Kommutators von Glg. (6.3)} \end{array} \right\} \theta(t) \\ &\quad + \left\{ \begin{array}{l} \text{2. Teil desselben Kommutators} \end{array} \right\} \theta(-t) \end{aligned} \quad (6.9)$$

Nach Durchführung der Zeitintegration erhält man (Konvergenzfaktoren wie bei D^R und D^A !)

$$D(\vec{k}, \omega) = Z^{-1} \sum_{m,n} M_k^\pm \left\{ e^{-\beta K_m} \frac{1}{\omega + K_m - K_n + i\epsilon} - e^{-\beta K_n} \frac{1}{\omega + K_m - K_n - i\epsilon} \right\} \quad (6.10)$$

Diese Funktion ist in keiner der beiden Halbebenen analytisch.

Für reelle ω lassen sich die Real- und Imaginärteile der Funk-

tionen einfach mit Hilfe der Dirac-Identität berechnen (P = Hauptwert):

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \frac{P}{x} \mp i\pi \delta(x) \quad . \quad (6.11)$$

Z.B. gilt

$$\begin{aligned} \bar{D}(\vec{k}, \omega) = Z^{-1} \sum_{m,n} M_{\vec{k}} e^{-\beta K_m} & \left\{ \frac{P}{\omega + K_m - K_n} \left[1 - e^{-\beta(K_n - K_m)} \right] \right. \\ & \left. - i\pi \delta(\omega + K_m - K_n) (1 + e^{-\beta(K_n - K_m)}) \right\} \end{aligned} \quad (6.12a)$$

$$D^R(\vec{k}, \omega) = Z^{-1} \sum_{m,n} M_{\vec{k}} (e^{-\beta K_m} - e^{-\beta K_n}) \left\{ \frac{P}{\omega + K_m - K_n} - i\pi \delta(\omega + K_m - K_n) \right\} \quad (6.12b)$$

Durch einfachen Vergleich der Funktionen (Gln. (6.8) , (6.10)) sieht man die Gleichheit der Realteile

$$\operatorname{Re} D^R(\vec{k}, \omega) = \operatorname{Re} D^A(\vec{k}, \omega) = \operatorname{Re} \bar{D}(\vec{k}, \omega) \quad , \quad (6.13)$$

während ein Vergleich von Gln. (6.12b) und (6.6) zeigt

$$\operatorname{Im} D^R(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{2} i D(\vec{k}, \omega) = -\frac{1}{2} \Delta(\vec{k}, \omega) \quad , \quad (6.14a)$$

und (wegen der Lage der Pole in der entgegengesetzten Halbebene) entsprechend

$$\operatorname{Im} D^A(\vec{k}, \omega) = -\frac{1}{2} i D(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{2} \Delta(\vec{k}, \omega) \quad , \quad (6.14b)$$

wobei wir die reelle (vgl. Glg. (6.6)) Spektralfunktion

$$\Delta(\vec{k}, \omega) = i D(\vec{k}, \omega) = -\Delta(-\vec{k}, -\omega) \quad (6.15)$$

eingeführt haben. Die Antisymmetrie von Δ folgt wegen Glg. (6.4) durch Vertauschen von m und n in Glg. (6.6).

Mit Hilfe der Spektralfunktion läßt die retardierte und die avancierte Dichte-Korrelationsfunktion (Glg. 6.8) sich darstellen als

$$D^R(\vec{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\Delta(\vec{k}, \omega')}{\omega - \omega' + i\epsilon} \quad (6.16)$$

(D^A entsprechend mit $-i\epsilon$) ,

wie man durch Einsetzen von Glg. (6.6) verifiziert.

Auch die zeitgeordnete Funktion läßt sich mit Hilfe der Spektralfunktion ausdrücken.

Gleichung (6.12) läßt sich durch

$$\overline{D}(\vec{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \Delta(\vec{k}, \omega') \left\{ \frac{P}{\omega - \omega'} - i\pi \coth\left(\frac{1}{2}\beta\omega\right) \delta(\omega - \omega') \right\} \quad (6.17)$$

reproduzieren, wobei wir die energierhaltende δ -Funktion sowie die folgende Identität ausgenutzt haben

$$\coth \frac{1}{2} x = (1 + \exp(-x)) / (1 - \exp(-x)) .$$

Damit gilt

$$\text{Im } \overline{D}(\vec{k}, \omega) = -\frac{1}{2} \Delta(\vec{k}, \omega) \coth\left(\frac{1}{2}\beta\omega\right) . \quad (6.18)$$

Als letzte wichtige Beziehung zwischen den verschiedenen Dichte-Korrelationsfunktionen sollen noch Kramers-Kronig-Relationen ("Dispersionsrelationen") angegeben werden.

Aus Glg. (6.12a) entnimmt man

$$\text{Im } \overline{D}(\vec{k}, \omega) = -\pi Z^{-1} \sum M_{\vec{k}} e^{-\beta K_m} \delta(\omega + K_m - K_n) \times (1 + e^{-\beta\omega}) \quad (6.19a)$$

$$\text{Re } \overline{D}(\vec{k}, \omega) = Z^{-1} \sum M_{\vec{k}} e^{-\beta K_m} \frac{P}{\omega + K_m - K_n} \times (1 - e^{-\beta(K_n - K_m)}) \quad (6.19b)$$

und damit

$$\text{Re } \overline{D}(\vec{k}, \omega) = -P \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\text{Im } \overline{D}(\vec{k}, \omega')}{\omega - \omega'} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta\omega'\right) \quad (6.19c)$$

Diese Relation gilt entsprechend für D^R und D^A , jedoch ohne die tanh-Funktion, wovon man sich durch Vergleich der Glgn.(6.13), (6.14) und (6.18) sofort überzeugen kann.

Vielfach werden Dichte-Korrelationen auch mit dem "Fluktuationsoperator"

$$\tilde{n}_{\vec{k}} = n_{\vec{k}} - \langle n_{\vec{k}} \rangle \quad (6.20)$$

definiert. Die mit dem Kommutator definierten Funktionen Δ , D^R , D^A unterscheiden sich dann nicht von den in dieser Arbeit verwendeten Funktionen, aber die zeitgeordnete Funktion enthält Zusatzterme

$$\begin{aligned} i \tilde{D}(\vec{k}t) &= \langle T(n_{\vec{k}}(t) - \langle n_{\vec{k}} \rangle)(n_{-\vec{k}}(0) - \langle n_{-\vec{k}} \rangle) \rangle \\ &= \langle T(n_{\vec{k}}(t)n_{-\vec{k}}(0)) \rangle - \langle n_{\vec{k}} \rangle \langle n_{-\vec{k}} \rangle \end{aligned} \quad (6.21)$$

6.2. Der dynamische Strukturfaktor $S(\vec{q}, \omega)$

Eine häufig verwendete Funktion ist der dynamische Strukturfaktor. Er beschreibt die Streueigenschaften des Systems in 1.Born'scher Näherung und hängt mit der Wahrscheinlichkeit P (pro Zeiteinheit) für den Übergang zwischen zwei Zuständen mit Impulsübertrag $\vec{q}$ und Energieübertrag ω auf folgende Art zusammen ($|W_{\vec{q}}|^2$ ist das Absolutquadrat des Übergangsmatrixelementes)

$$P(\vec{q}, \omega) = 2 \pi |W_{\vec{q}}|^2 S(\vec{q}, \omega) \quad (6.22)$$

S wird meist als (nicht-zeitgeordnete) Dichte-Korrelationsfunktion definiert und hat dann für $T \neq 0$ die Darstellung

$$S(\vec{q}, \omega) = Z^{-1} \sum_{m,n} e^{-\beta K_m} M_{\vec{q}} \delta(\omega + K_m - K_n) \quad (6.23)$$

Mit Hilfe der rein reellen Spektralfunktion $\Delta = i D$ läßt sich S auch schreiben als (vgl. Lit. 26, S. 135)

$$\Delta(\vec{q}, \omega) = 2 \pi S(\vec{q}, \omega)(1 - e^{-\beta \hbar \omega}) \quad (6.24)$$

Aus der Antisymmetrie von Δ (und der Tatsache, daß Erwartungswerte von Teilchendichteoperatoren nur von $|\vec{q}|$ abhängen!) folgt dann sofort die Bedingung des "detaillierten Gleichgewichts"

$$S(\vec{q}, -\omega) = e^{-\beta \hbar \omega} S(\vec{q}, \omega) \quad (6.25)$$

Der exakte dynamische Strukturfaktor erfüllt einige Summenregeln, von denen insbesondere diejenige für das 1. Moment (die sogenannte f-Summen-Regel) von Bedeutung ist (N Teilchenzahl)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \omega S(\vec{q}, \omega) d\omega = N q^2 / (2m) . \quad (6.26)$$

Anschaulich bedeutet diese Regel, daß die Summe der Oszillatorstärken gleich der Gesamtzahl der Oszillatoren ist ²⁶⁾, was dem Erhaltungssatz für die Teilchenzahl entspricht. Wegen Glgn. (6.24) und (6.25) läßt sich die Summenregel auf die Spektralfunktion Δ abwälzen

$$\Delta(\vec{q}, \omega) = 2\pi \{ S(\vec{q}, \omega) - S(\vec{q}, -\omega) \} ,$$

und durch Umtaufen der Integrationsvariablen $\omega \rightarrow -\omega$ folgt

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} \omega \Delta(\vec{q}, \omega) = 2 \int d\omega \omega S(\vec{q}, \omega) = N q^2 / m \quad (6.27)$$

Für den Beweis der Summenregel kann man etwa folgendermaßen vorgehen. Aus der Darstellung von Δ (Gln. (6.6)) erhält man nach Integration über ω

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} \omega \Delta(\vec{q}, \omega) = Z^{-1} \sum_{m, n} (K_n - K_m) M_{\vec{q}} (e^{-\beta K_m} - e^{-\beta K_n}) .$$

Der Faktor $(K_n - K_m)$ läßt sich durch das Matrixelement der Dichteänderung (totale Zeitableitung) erzeugen

$$-i \langle n | \dot{n}_{\vec{q}}(t) | m \rangle = (K_n - K_m) \exp(i(K_n - K_m)t) \langle n | n_{\vec{q}} | m \rangle$$

Wegen der Heisenberggleichung $\dot{n}_{\vec{q}}(t) = (i/\hbar)[H_0, n_{\vec{q}}(t)]$

gilt dann in Analogie zu Glg. (6.3)

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} \omega \Delta(\vec{q}, \omega) = - \langle [[H_0, n_{\vec{q}}], n_{-\vec{q}}] \rangle_0 = \langle [n_{\vec{q}}, [H_0, n_{-\vec{q}}]] \rangle_0 \quad (6.28)$$

Das letzte Gleichheitszeichen gilt wegen $[A, B]^+ = [B^+, A^+]$.

Damit bleibt zu zeigen

$$\langle [n_{\vec{q}}, [H_0, n_{-\vec{q}}]] \rangle_0 = N q^2 / m . \quad (6.29)$$

Wenn H_0 als exakter Hamiltonoperator nur ein instantanes Zweiteilchen-Potential enthält (wie es in unserem System der Fall ist), trägt zu Glg. (6.29) nur der Operator der kinetischen Energie bei, und die Summenregel gilt:

$$\langle [[,]] \rangle_0 = q^2 / m \sum \langle c_k^\dagger c_k \rangle_0 .$$

$$(6.30)$$

Für physikalisch sinnvolle Approximationen sollten die gleichen Erhaltungssätze wie im exakten System gelten. Dies läßt sich für die f-Summen-Regel am besten durch Berechnung von Glg. (6.29) in der jeweiligen Näherung nachweisen.

In unserer Approximation wird - was wir in Kapitel 7 tun - H_0 durch H_t ersetzt und dann zunächst eine (verallgemeinerte) HF-Näherung für die Dichte-Korrelationsfunktion D^R berechnet. Diese Zweiteilchenfunktion verwenden wir dann als Propagator niedrigster Ordnung in einer RPA für D^R . Leider ergibt aber Glg. (6.29) mit $H_0 = H_t$ nur die Summenregel für die HFA der Dichte-Korrelationsfunktion, so daß wir die Summenregel in unserer Approximation nicht auf diese Weise überprüfen können.

6.3 Dynamische Suszeptibilität und Polarisationsfunktion

Gleichung (5.21) legt die Definition einer verallgemeinerten dynamischen Suszeptibilität als das Verhältnis von Wirkung (hier: Dichteänderung) zu Ursache (hier: skalares Potential) nahe:

$$\chi_{nn}(\vec{k}, \omega) \equiv \frac{\delta \langle n(\vec{k}, \omega) \rangle}{U(\vec{k}, \omega)} = \hbar^{-1} D^R(\vec{k}, \omega) . \quad (6.31)$$

Diese (Dichte-Dichte-) Suszeptibilität ist also bis auf den Faktor $\hbar$ mit der retardierten Dichte-Korrelationsfunktion identisch. Dieselbe nahe Verwandtschaft gilt zwischen der Dichte-Korrelationsfunktion und der Polarisationsfunktion, wie im Lehrbuch von Fetter und Walecka ²⁷⁾ (S. 153) anhand einer diagrammatischen Störungsentwicklung für die beiden zeitgeordneten Funktionen gezeigt wird.

Das Ergebnis ist

$$\bar{\Pi}(\vec{k}, \omega) = \hbar^{-1} \bar{D}(\vec{k}, \omega) . \quad (6.32)$$

Die zeitgeordnete Dichte-Korrelationsfunktion ist dort wieder mit Hilfe der "Fluktuationsoperatoren" $\tilde{n}$ (vgl. Glg. (6.21)) definiert und enthält daher faktorisierte Zusatzterme. Die zugehörigen retardierten Funktionen stimmen mit der in dieser Arbeit gewählten Definition überein.

7. Berechnung von $D^R(\vec{k}, \omega)$ für ein kondensiertes Bose-System

7.1. Formale Ring-Approximation für die dielektrische Funktion

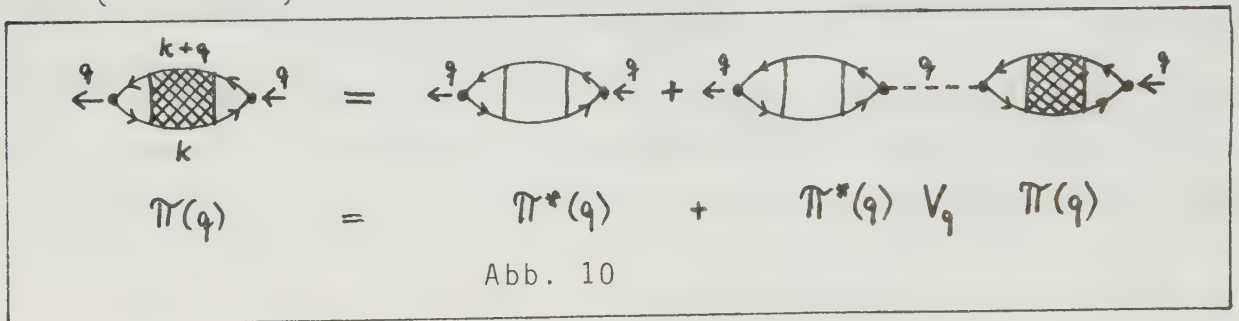
Die Berechnung der Dichte-Korrelationsfunktion ist in voller Allgemeinheit (Bildung des Erwartungswertes bezgl. des exakten wechselwirkenden Hamiltonoperators) nicht möglich. Da wir das System bereits in selbstkonsistenter verallgemeinerter HF-Näherung berechnet haben, wie sie durch das Bogoliubov'sche Variationsprinzip definiert ist, liegt es nahe, alle Erwartungswerte mit dem effektiven Hamiltonoperator

$$H_t = \sum_k E_k \bar{c}_k^+ \bar{c}_k \quad (7.1)$$

zu berechnen. Die so gefundene Approximation

$$i D^R(\vec{q}, \omega) \approx \int_0^\infty dt \langle [n_{\vec{q}}(t), n_{-\vec{q}}(0)] \rangle_t \exp(i\omega t) \quad (7.2)$$

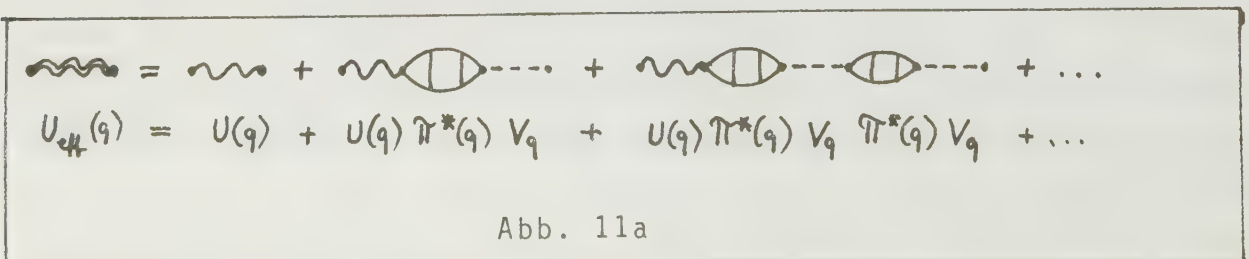
ist dann zugleich auch eine Approximation für die (retardierte) irreduzible Polarisationsfunktion ²⁷⁾. Mit Hilfe der irreduziblen Polarisationsfunktion Π^* läßt sich dann eine Ring-Approximation (RPA) durchführen, wie sie in Abb. 10 graphisch veranschaulicht wird ($q \equiv (\vec{q}, \omega)$)



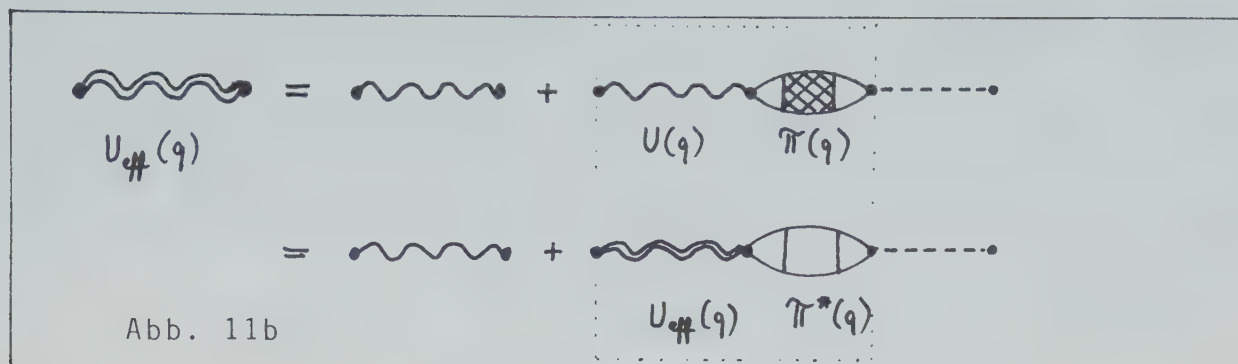
Als Ergebnis erhalten wir die RPA-Polarisationsfunktion

$$\Pi(q) = \Pi^*(q) (1 - V_q \Pi^*(q))^{-1}. \quad (7.3)$$

Durch die Dichte-Korrelationen wird das externe Störpotential $U(q)$ modifiziert zu (Abb. 11a)



mit der Lösung (Ziman ²⁵⁾ - 45 - , S. 157)



Damit die Gültigkeit der linearen Näherung gewährleistet wird, muß $U(q)$ ein schwaches (z.B. infinitesimales) Störpotential sein; alle Beiträge der diagrammatischen Störungsentwicklung, in denen $U(q)$ in höherer als 1. Ordnung auftaucht, sind daher vernachlässigbar. Hingegen stellt V_q das "nackte", im allgemeinen keineswegs schwache Zweiteilchen-Potential dar, vermittels dessen sich die korrelierten Dichteschwankungen im System ausbreiten. In unserer Rechnung ist V_q durch das frequenzunabhängige Modellpotential W_q ersetzt.

Das modifizierte "effektive" und das externe Störpotential sind durch die dielektrische Funktion $\epsilon(\vec{q}, \omega)$ verknüpft

$$U_{\text{eff}}(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\epsilon(\vec{q}, \omega)} U(\vec{q}, \omega) . \quad (7.4)$$

Aus Abb. 11b erkennt man, daß die Beziehung

$$U_{\text{eff}}(q) \Pi^*(q) = U(q) \Pi(q) = \frac{\Pi^*(q)}{1 - V_q \Pi^*(q)} U(q) \quad (7.5)$$

gilt und damit für die dielektrische Funktion folgt:

$$\epsilon(\vec{q}, \omega) = 1 - V_q \Pi^*(\vec{q}, \omega) . \quad (7.6)$$

An den Nullstellen der dielektrischen Funktion kann das System also durch ein infinitesimales externes Störpotential angeregt werden. Die Lösungen $\omega_q = \omega(\vec{q})$ der Dispersionsrelation

$$1 = V_q \Pi^*(\vec{q}, \omega) \quad (7.7)$$

beschreiben also die gesuchten Anregungsenergien als Funktion des Wellenzahlvektors $\vec{q}$.

7.2. Verallgemeinerte HF-Näherung für die Dichte-Korrelationsfunktion

Wir beschränken uns auf die Berechnung des retardierten Dichte-Dichte-Kommutators in HF-Näherung. Ein Übergang z.B. zu den entsprechenden zeitgeordneten Funktionen kann dann auf dem in Kapitel 6 dargestellten Weg erfolgen. In unserer Approximation entspricht $H_0 = H_t$ und damit

$$\rho_0 = \rho_t = \exp(-\beta H_t) / \text{tr} \exp(-\beta H_t). \quad (7.8)$$

Die Zeitabhängigkeit der Dichte-Operatoren ist

$$n_{\vec{q}}(t) = \exp(i H_t t) n_{\vec{q}} \exp(-i H_t t). \quad (7.9)$$

In dem durch H_t definierten "Quasiteilchensystem" lassen sich die Erwartungswerte von Produkten aus Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren einfach durch Transformation ins "Quasiteilchenbild" berechnen

$$c_{\vec{k}}^{\dagger} = u_{\vec{k}}^* \bar{c}_{\vec{k}}^{\dagger} + v_{\vec{k}}^* \bar{c}_{-\vec{k}} + \zeta^* \delta_{\vec{k}0}, \quad (7.10)$$

$$\text{Wegen} \quad n_{\vec{q}} = \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^{\dagger} c_{\vec{k}+\vec{q}} \quad (5.16b)$$

werden dabei Terme der Form

$$\begin{aligned} c_{\vec{n}}^{\dagger} c_{\vec{\ell}} = & u_{\vec{n}}^* u_{\vec{\ell}} \bar{c}_{\vec{n}}^{\dagger} \bar{c}_{\vec{\ell}} + v_{\vec{n}}^* v_{\vec{\ell}} \bar{c}_{-\vec{n}} \bar{c}_{-\vec{\ell}} + u_{\vec{n}}^* v_{\vec{\ell}} \bar{c}_{\vec{n}}^{\dagger} \bar{c}_{-\vec{\ell}} + v_{\vec{n}}^* u_{\vec{\ell}} \bar{c}_{-\vec{n}} \bar{c}_{\vec{\ell}} \\ & + |\zeta|^2 \delta_{\vec{n}0} \delta_{\vec{\ell}0} + \zeta (u_{\vec{n}}^* \bar{c}_{\vec{n}}^{\dagger} + v_{\vec{n}}^* \bar{c}_{-\vec{n}}) \delta_{\vec{\ell}0} + \zeta^* (u_{\vec{\ell}} \bar{c}_{\vec{\ell}} + v_{\vec{\ell}} \bar{c}_{-\vec{\ell}}^{\dagger}) \delta_{\vec{n}0} \end{aligned} \quad (7.11)$$

benötigt. Der zu berechnende Erwartungswert des Kommutators lautet explizit (s. Glg.(7.2))

$$B(\vec{q}t) \equiv \sum_{\vec{k}} \langle [c_{\vec{k}}^{\dagger}(t) c_{\vec{k}+\vec{q}}(t), c_{\vec{p}}^{\dagger} c_{\vec{p}-\vec{q}}] \rangle_t. \quad (7.12)$$

Die Quasiteilchen-Operatoren besitzen die einfache Zeitabhängigkeit

$$\bar{c}_{\vec{k}}^{\dagger}(t) = \exp(i H_t t) \bar{c}_{\vec{k}}^{\dagger} \exp(-i H_t t) = \exp(i E_{\vec{k}} t) \bar{c}_{\vec{k}}^{\dagger}, \quad (7.13a)$$

$$\bar{c}_{\vec{\ell}}(t) = \exp(-i E_{\vec{\ell}} t) \bar{c}_{\vec{\ell}}. \quad (7.13b)$$

Da nur Erwartungswerte mit gleich vielen Erzeugungs- wie Vernich-

tungsoperatoren für Quasiteilchen nicht verschwinden, reduziert sich die Zahl der im Quasiteilchenbild zu berechnenden Kommutatoren erheblich. Wir erhalten Beiträge von folgenden Typen von Kommutatoren

$$\begin{aligned} B_{1,1} &\sim \langle [\bar{c}_{\vec{k}}^+, \bar{c}_{-\vec{p}}] \rangle_t, \\ B_{11,11} &\sim \langle [\bar{c}_{\vec{k}}^+ \bar{c}_{\vec{k}+\vec{q}}, \bar{c}_{\vec{p}}^+ \bar{c}_{\vec{p}-\vec{q}}] \rangle_t, \\ B_{2,2} &\sim \langle [\bar{c}_{\vec{k}}^+ \bar{c}_{-\vec{k}-\vec{q}}, \bar{c}_{-\vec{p}} \bar{c}_{\vec{p}-\vec{q}}] \rangle_t. \end{aligned} \quad (7.14)$$

Nach einer länglichen Rechnung*) ergibt sich mit der Quasiteilchenzahl

$$\bar{n}_{\vec{k}} \equiv \langle \bar{c}_{\vec{k}}^+ \bar{c}_{\vec{k}} \rangle_t = \langle \bar{c}_{-\vec{k}}^+ \bar{c}_{-\vec{k}} \rangle_t \quad (2.10)$$

und mit den nach Symmetrisierung der Summationsindices sinnvollen Abkürzungen

$$u_+ \triangleq u_{|\vec{k}+\vec{q}/2|}, \quad u_- \triangleq u_{|\vec{k}-\vec{q}/2|} \text{ usw.}$$

folgendes Ergebnis

$$\begin{aligned} B(\vec{q}t) &= \langle [n_{\vec{q}}(t), n_{-\vec{q}}(0)] \rangle_t = B_{1,1} + B_{11,11} + B_{2,2}, \\ B_{1,1} &= - \left\{ |\zeta|^2 (|u_q|^2 + |v_q|^2) + \zeta^2 u_q^* v_q^* + \zeta^{*2} u_q v_q \right\} \\ &\quad \times \left\{ \exp(i E_q t) - \exp(-i E_q t) \right\}, \\ B_{11,11} &= \sum (\bar{n}_- - \bar{n}_+) \left\{ [|u_-|^2 |u_+|^2 + u_-^* v_-^* u_+ v_+] \exp[i(E_- - E_+)t] \right. \\ &\quad \left. - [|v_-|^2 |v_+|^2 + u_-^* v_-^* u_+ v_+] \exp[-i(E_- - E_+)t] \right\}, \\ B_{2,2} &= - \sum (\bar{n}_- + \bar{n}_+ + 1) \left\{ [|u_-|^2 |v_+|^2 + u_-^* v_-^* u_+ v_+] \exp[i(E_- + E_+)t] \right. \\ &\quad \left. - [|v_-|^2 |u_+|^2 + u_-^* v_-^* u_+ v_+] \exp[-i(E_- + E_+)t] \right\}. \end{aligned} \quad (7.15)$$

Mit Hilfe der Ergebnisse aus der Variationsrechnung

$$\begin{aligned} |u_k|^2 &= \frac{1}{2}(\tilde{\epsilon}_k/E_k + 1), \quad |v_k|^2 = \frac{1}{2}(\tilde{\epsilon}_k/E_k - 1), \\ u_k v_k &= -\Delta_k/(2 E_k), \quad \zeta = N_0^{\frac{1}{2}} \exp(i\varphi) \end{aligned} \quad (7.16)$$

lassen sich die fünf Faktoren vor den Exponentialfunktionen weiter vereinfachen. Da sich die Ergebnisse der Variationsrechnung

*) Einzelheiten sind im Anhang B aufgeführt

mit rein reellen Parametern u_k , v_k , Δ_k darstellen lassen, können wir diese Parameter auch hier rein reell wählen. Es ergibt sich für die fünf Faktoren

$$\begin{aligned} Z_1 &= + (N_0/E_q) \left\{ \tilde{\epsilon}_q - \Delta_q \right\}, \\ Z_2 &= (4 E_+ E_-)^{-1} \left\{ (\tilde{\epsilon}_- + E_-)(\tilde{\epsilon}_+ + E_+) + \Delta_- \Delta_+ \right\}, \\ Z_3 &= (4 E_+ E_-)^{-1} \left\{ (\tilde{\epsilon}_- - E_-)(\tilde{\epsilon}_+ - E_+) + \Delta_- \Delta_+ \right\}, \\ Z_4 &= (4 E_+ E_-)^{-1} \left\{ (\tilde{\epsilon}_- + E_-)(\tilde{\epsilon}_+ - E_+) + \Delta_- \Delta_+ \right\}, \\ Z_5 &= (4 E_+ E_-)^{-1} \left\{ (\tilde{\epsilon}_- - E_-)(\tilde{\epsilon}_+ + E_+) + \Delta_- \Delta_+ \right\}. \end{aligned} \quad (7.17)$$

Wir führen nun die Fouriertransformation zur Frequenzdarstellung durch. Strenggenommen handelt es sich um eine Laplace-Transformation. Dies sei durch die Wahl einer komplexen Variablen $z = \omega + i\epsilon$ mit reellem ω kenntlich gemacht. Damit die Stammfunktion des Integranden bei $t = \infty$ existiert, muß $\epsilon = \text{Im } z > 0$ sein (was z.B. durch den Konvergenzfaktor des Stör-Hamiltonoperators gewährleistet ist). Wir erhalten

$$\begin{aligned} D^R(\vec{q}, z) &= i^{-1} \int_0^\infty dt \exp(izt) B(\vec{q}, t) \\ &= - \left\{ \frac{1}{z + E_q} - \frac{1}{z - E_q} \right\} Z_1 \\ &\quad + \sum (\bar{n}_- - \bar{n}_+) \left\{ \frac{Z_2}{z + (E_- - E_+)} - \frac{Z_3}{z - (E_- - E_+)} \right\} \\ &\quad - \sum (\bar{n}_- + \bar{n}_+ + 1) \left\{ \frac{Z_4}{z + (E_- + E_+)} - \frac{Z_5}{z - (E_- + E_+)} \right\}. \end{aligned} \quad (7.18)$$

7.3. Diskussion des Ergebnisses

Der retardierte Charakter dieser Dichte-Korrelationsfunktion ist an der Lage ihrer Pole ersichtlich: sie liegen sämtlich in der unteren Halbebene. Durch Umbenennung der Summationsvariable $\vec{k} \rightarrow -\vec{k}$ bzw. Ausnutzung der Spiegelungsinvarianz bzgl. $\vec{q}$ (dies entspricht einem formalen Vertauschen der Indizes $+\triangleq |\vec{k}+\vec{q}/2|$ und $-\triangleq |\vec{k}-\vec{q}/2|$) lassen sich die Zähler Z_2 und Z_3 sowie Z_4 und Z_5 zusammenfassen. Mit

$$Z_2 + Z_3 = \frac{1}{2} \left(\frac{\tilde{\epsilon}_+ \tilde{\epsilon}_- + \Delta_+ \Delta_-}{E_+ E_-} + 1 \right), \quad (7.19a)$$

$$Z_4 + Z_5 = \frac{1}{2} \left(\frac{\tilde{\epsilon}_+ + \tilde{\epsilon}_- + \Delta_+ + \Delta_-}{E_+ E_-} - 1 \right) \quad (7.19b)$$

erhalten wir $D^R(\vec{q}, z) = T_1^+ + \frac{1}{2} \{ T_2^+ + T_3^+ \}$ (7.20)

mit

$$\begin{aligned} T_1^+ &= - \frac{N_0}{E_q} (\tilde{\epsilon}_q - \Delta_q) \cdot \left\{ \frac{1}{z + E_q} - \frac{1}{z - E_q} \right\}, \\ T_2^+ &= + \frac{1}{2} (\bar{n}_- - \bar{n}_+) \left(\frac{\tilde{\epsilon}_+ + \tilde{\epsilon}_- + \Delta_+ + \Delta_-}{E_+ E_-} + 1 \right) \left\{ \frac{1}{z + (E_- - E_+)} - \frac{1}{z - (E_- - E_+)} \right\}, \\ T_3^+ &= - \frac{1}{2} (\bar{n}_+ + \bar{n}_- + 1) \left(\frac{\tilde{\epsilon}_+ + \tilde{\epsilon}_- + \Delta_+ + \Delta_-}{E_+ E_-} - 1 \right) \left\{ \frac{1}{z + (E_- + E_+)} - \frac{1}{z - (E_- + E_+)} \right\}. \end{aligned} \quad (7.21)$$

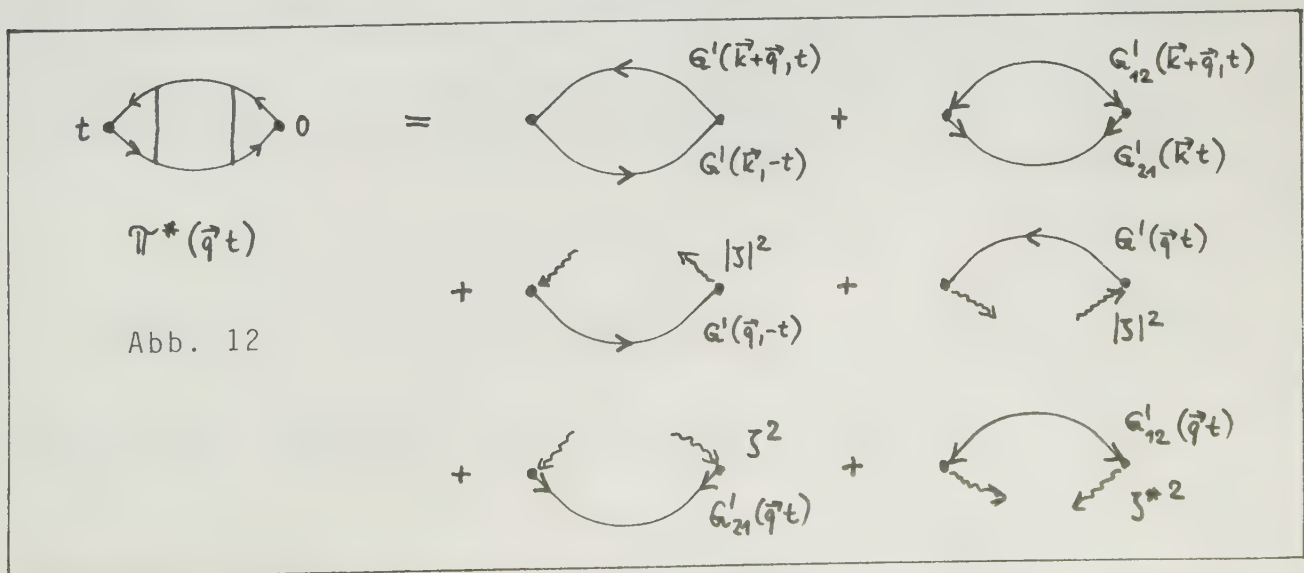
Durch Einsetzen sieht man sofort, daß D^R eine gerade Funktion von z ist

$$D^R(\vec{q}, z) = D^R(\vec{q}, -z) . \quad (7.22)$$

$D^R(\vec{q}, z)$ enthält drei Arten von Polen, die möglichen Anregungen entsprechen

- a) 1-Quasiteilchen-Anregungen: $z = \pm E_q$,
- b) 2-Quasiteilchen-Anregungen $z = \pm (E_- + E_+)$,
- c) "kollektive" Anregungen: $z = \pm (E_- - E_+)$.

Ehe wir daran gehen, Grenzfälle von D^R zu untersuchen und Energiespektren zu berechnen, soll noch die Art der vorliegenden Approximation durch diagrammatische Analyse aufgehehlt werden. Es wurde schon erwähnt, daß die approximative Dichte-Korrelationsfunktion als Näherung für die wahre (irreduzible) Polarisationsfunktion verwendet werden kann. Diese Funktion ist für ein kondensiertes Bosonensystem dann durch folgende Diagramme gegeben (Abb. 12):



Die hierbei verwendeten Einteilchen-Green'schen Funktionen sind die HF-Approximationen der ursprünglich von Beliaev ⁶⁾ eingeführten Funktionen. Sie sind definiert durch
(' bedeutet $\vec{k} \neq 0$)

$$\overleftarrow{\hspace{1.5cm}} = iG'(\vec{k}t) = \langle T(c_{\vec{k}}(t)c_{\vec{k}}^{\dagger}(0)) \rangle_t, \quad (7.23a)$$

$$\longleftrightarrow = iG'_{12}(\vec{k}t) = \langle T(c_{-\vec{k}}(t)c_{\vec{k}}(0)) \rangle_t, \quad (7.23b)$$

$$\overrightarrow{\hspace{1.5cm}} = iG'_{21}(\vec{k}t) = \langle T(c_{\vec{k}}^{\dagger}(t)c_{-\vec{k}}(0)) \rangle_t. \quad (7.23c)$$

Die Kondensat-Funktionen $|\zeta|^2, \zeta^2$ und ζ^{*2} sind zeitlich konstant.

Mit diesen Green'schen Funktionen (zu reellen Zeiten!) kann man nur den Grundzustand berechnen; zur Berechnung der Dichte-Korrelationsfunktion für endliche Temperaturen T muß der Formalismus der Temperatur-Green'schen Funktionen benutzt werden. Für die hier diagrammatisch veranschaulichte Approximation ist diese Berechnung im Anhang A durchgeführt.

Um Mißverständnisse zu vermeiden, sei an dieser Stelle noch einmal betont, daß die Dichte-Korrelationsfunktion (Glg.(7.20)) die HF-Approximation für eine Zweiteilchen-Funktion ist und der wahren Polarisationsfunktion Π^* entspricht. Dagegen folgt die Dispersionsrelation (7.7) aus der RPA für die Dichte-Korrelationsfunktion (die gleich der entsprechenden Approximation für die Polarisationsfunktion Π ist). Diese Funktion lautet mit Glg.(7.3) und (7.20) explizit

$$D_{RPA}^R(\vec{q}z) = D^R(\vec{q}z) (1 - W_q D^R(\vec{q}z))^{-1}. \quad (7.24)$$

Wir werden uns im folgenden immer auf die HF-Näherung beziehen, wenn von "Dichte-Korrelationsfunktion" die Rede ist.

7.4 Langwelliger und statischer Grenzfall

Im langwelligen Grenzfall gilt $q \rightarrow 0$ bzw. $q/\omega \ll 1$.

Für reelle Frequenzen $z = \omega$ erhalten wir

$$D^R(\vec{q} \rightarrow 0, \omega) = T_1^+(\vec{q}\omega) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \{T_2^+(\vec{k}\vec{q}\omega) + T_3^+(\vec{k}\vec{q}\omega)\}. \quad (7.25)$$

Da E_q für kleine q proportional q^2 geht, ist

$$T_1^+(\vec{q}\omega) \simeq 2N_0(\tilde{\epsilon}_0 - \Delta_0)(\omega^2 - E_0^2)^{-1} = T_1^+(0\omega). \quad (7.26)$$

Die Energien $E_{\pm}$ lassen sich ebenso wie die Besetzungszahlen entwickeln ($\pm \hat{=} |\vec{k} \pm \vec{q}/2| \simeq \sqrt{k^2 \pm kqx} \simeq k \pm qx/2$ für $q \rightarrow 0$)

$$E_{\pm} = E_k \pm \frac{1}{2} qx E'_k, \quad (7.27a)$$

$$\bar{n}_{\pm} = \bar{n}_k \pm \frac{1}{2} qx \frac{\partial \bar{n}_k}{\partial E_k} E'_k, \quad (7.27b)$$

mit $\vec{q} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} = qx \frac{\partial}{\partial k}$ und $E'_k \equiv \frac{\partial E_k}{\partial k}$.

Dann gilt für T_2^+ :

$$\begin{aligned} T_2^+(\vec{k}\vec{q}\omega) &\simeq \frac{1}{2} (-qx \frac{\partial \bar{n}_k}{\partial E_k} E'_k) \left(\frac{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_k^2}{E_k^2} + 1 \right) \left\{ (\omega - \frac{1}{2} qx E'_k)^{-1} - (\omega + \frac{1}{2} qx E'_k)^{-1} \right\} \\ &\simeq qx \left(-\frac{\partial \bar{n}_k}{\partial E_k} \right) E'_k \frac{\tilde{\epsilon}_k^2}{E_k^2} \frac{1}{\omega} \left\{ \frac{qx E'_k}{\omega} \right\} \\ &= \frac{1}{\omega^2} (qx)^2 \left(\frac{\tilde{\epsilon}_k}{E_k} E'_k \right)^2 \left(-\frac{\partial \bar{n}_k}{\partial E_k} \right) \end{aligned} \quad (7.28)$$

und mit $B_k = \coth(\frac{1}{2}\beta E_k) = 2\bar{n}_k + 1$:

$$\begin{aligned} T_3^+(\vec{k}\vec{q}\omega) &\simeq -\frac{1}{2} B_k \left(\frac{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_k^2}{E_k^2} - 1 \right) \frac{-4E_k}{\omega^2 - 4E_k^2} \\ &= 4B_k \frac{\Delta_k^2}{E_k} (\omega^2 - 4E_k^2)^{-1}. \end{aligned} \quad (7.29)$$

Damit lautet die Dichte-Korrelationsfunktion im langwelligen Grenzfall

$$\begin{aligned} D^R(\vec{q} \rightarrow 0, \omega) &\simeq \frac{2N_0(\epsilon_0 - \Delta_0)}{\omega^2 - E_0^2} + \frac{1}{2} \sum \left\{ \left(\frac{qx}{\omega} \right)^2 \left(\frac{\tilde{\epsilon}_k}{E_k} E'_k \right)^2 \left(-\frac{\partial \bar{n}_k}{\partial E_k} \right) \right. \\ &\quad \left. + 4 \frac{\Delta_k^2}{E_k} B_k (\omega^2 - 4E_k^2)^{-1} \right\}. \end{aligned} \quad (7.30)$$

Die Integrationen über die Richtungswinkel sind sofort durchführbar und ergeben $2\pi \cdot \frac{2}{3}(T_2^*)$ bzw. $4\pi(T_3^*)$. Die verbleibenden Integrale über $|\vec{k}|$ lassen sich nur numerisch berechnen.

Der statische Grenzfall ist definiert durch $\omega = 0$ bzw. $\omega/q \ll 1$.

Wir erhalten dann

$$D^R(\vec{q}0) = -2 \frac{N_0}{E_q^2} (\tilde{\epsilon}_q - \Delta_q) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \left\{ \left(\frac{\tilde{\epsilon}_+ \tilde{\epsilon}_- + \Delta_+ \Delta_-}{E_+ E_-} + 1 \right) \frac{\bar{n}_- - \bar{n}_+}{E_- - E_+} - \left(\frac{\tilde{\epsilon}_+ \tilde{\epsilon}_- + \Delta_+ \Delta_-}{E_+ E_-} - 1 \right) \frac{\bar{n}_+ + \bar{n}_- + 1}{E_- - E_+} \right\}. \quad (7.31)$$

Dieser Ausdruck läßt sich nur für $q \rightarrow 0$ weiter vereinfachen

$$D^R(\vec{q} \rightarrow 0, 0) = -2 \frac{N_0}{E_0^2} (\tilde{\epsilon}_0 - \Delta_0) - \sum_{\vec{k}} \left\{ \frac{\tilde{\epsilon}_k^2}{E_k^2} \left(-\frac{\partial \bar{n}_k}{\partial E_k} \right) + \frac{\Delta_k^2}{2E_k^3} B_k \right\}, \quad (7.32)$$

wobei wir $(\bar{n}_+ - \bar{n}_-)/(E_+ - E_-) \simeq \partial \bar{n}_k / \partial E_k \quad (q \rightarrow 0) \quad (7.33)$

benutzt haben.

8. Anregungsspektrum eines kondensierten Bose-Systems

In diesem Kapitel soll gezeigt werden, daß in einem (Modell-) Bose-System ungedämpfte Anregungen existieren, deren Spektrum die (experimentell von He II bekannte) "Phonon-Roton"-Form hat. (Dieses Spektrum kann nicht aus einer Rechnung für $T \equiv 0$ abgeleitet werden).

8.1 Dispersionsrelation der energetisch niedrigsten Anregungen

Die Anregungsenergien ω_q des Systems sind nach Glg.(7.7) gegeben durch die Dispersionsrelation ($\Pi_R^* = D^R$)

$$1 = W_q \Pi_R^*(\vec{q}, \omega_q) \quad (8.1)$$

mit dem Modellpotential W_q , das für nicht zu große q positiv ist. Zur Berechnung der Anregungsenergien bringen wir Glg.(8.1) auf eine für diesen Zweck geeignetere Form. Dazu werten wir im Grenzfall sehr großer Lebensdauer ($\text{Im } \omega_q \rightarrow 0$) mit Hilfe der Dirac-Identität (6.11) den Realteil von Glg.(8.1) aus und fassen die Nenner zusammen. Für den Realteil der retardierten Dichte-Korrelationsfunktion erhalten wir

$$\text{Re } D^R(\vec{q}, \omega_q) = T_1^+ + \frac{1}{2} \mathcal{P} \sum_{\vec{k}} \{ T_2^+ + T_3^+ \} \quad (8.2)$$

$$\text{mit } T_1^+ \equiv -2N_0 (\tilde{\epsilon}_q - \Delta_q) \frac{1}{E_q^2 - \omega_q^2}, \quad (8.3)$$

$$T_2^+ \equiv + \left(\frac{\tilde{\epsilon}_- \tilde{\epsilon}_+ + \Delta_- \Delta_+}{E_- E_+} + 1 \right) (\bar{n}_- - \bar{n}_+) (E_+ - E_-) \frac{1}{\omega_q^2 - (E_- - E_+)^2},$$

$$T_3^+ \equiv - \left(\frac{\tilde{\epsilon}_- \tilde{\epsilon}_+ + \Delta_- \Delta_+}{E_- E_+} - 1 \right) (\bar{n}_- + \bar{n}_+ + 1) (E_+ + E_-) \frac{1}{(E_- + E_+)^2 - \omega_q^2}.$$

Die Summation über alle Impulse $\vec{k}$ ist dabei als Hauptwertintegral durchzuführen. Aus Glg.(8.3) sind die Vorzeichen der einzelnen Terme für niedrig liegenden Anregungen ($|\omega_q| \ll E_q$) explizit ersichtlich: 1) da für alle untersuchten Potentiale $\tilde{\epsilon}_q > |\Delta_q|$ gilt, ist T_1^+ insgesamt ein negativer Beitrag.

2) Sämtliche (durch Klammern abgegrenzte) Faktoren von T_3^+ sind nicht negativ, T_3^+ ist also für kleine $|\omega_q|$ negativ.

3) Da die Bose-Funktionen

$$\bar{n}_{\pm} = [\exp(\beta E_{\pm}) - 1]^{-1} \quad (8.4)$$

streng antitone Funktionen von $E_{\pm}$ sind, gilt stets

$$(\bar{n}_{-} - \bar{n}_{+})(E_{+} - E_{-}) \geq 0. \quad (8.5)$$

Damit ist das Vorzeichen von $T_2^{\dagger}$ durch dasjenige seines Nenners bestimmt! Nur für positive Terme $T_2^{\dagger}$ ist die Dispersionsrelation für niedrig liegende Anregungen überhaupt erfüllbar, wenn $1/W_q$ positiv ist.

Die große Lücke im Quasiteilchenspektrum $E_{k \rightarrow 0} \approx 40$ K gestattet nun eine relativ einfache Berechnung der niedrig liegenden Anregungsenergien. Für $|\omega_q| < E_q$ sind die Terme $T_1^{\dagger}$ und $T_3^{\dagger}$ für alle Temperaturen unterhalb T_c relativ große Beiträge. Dagegen ist $T_2^{\dagger}$ wegen der Differenz der thermischen Besetzungszahlen $\bar{n}_{-} - \bar{n}_{+}$ ein verschwindend kleiner Beitrag, außer in der Umgebung des Pols

$$|\omega_q| = |E_{-} - E_{+}|.$$

Wir können daher die Summation über $\vec{k}$ auf die Umgebung der Polstellen beschränken. Für ein zylindersymmetrisches System gilt ($\vec{q}$ in z-Richtung, dann ist $\theta = \angle(\vec{q}, \vec{k})$)

$$\sum_{\vec{k}} \longrightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k = \frac{V}{4\pi^2} \int_0^{\infty} k^2 dk \int_{-1}^1 d(\cos \theta). \quad (8.6)$$

Die Terme $T_2^{\dagger}$ und $T_3^{\dagger}$ sind symmetrische Funktionen von $x = \cos \theta$, da beim Übergang $x \rightarrow -x$ gerade die Vorzeichenindices ($\pm$) vertauscht werden wegen $\pm \hat{=} |\vec{k} \pm \vec{q}/2| = (k^2 + q^2/4 \pm kqx)^{1/2}$. Damit lautet die durchzuführende Integration

$$V (2\pi^2)^{-1} \mathcal{P} \int_0^{\infty} k^2 dk \int_0^1 dx \{T_2^{\dagger}(k, x) + T_3^{\dagger}(k, x)\}.$$

In einer hinreichend kleinen Umgebung der Pole sind Funktionen wie $\bar{n}_{\pm}$, $E_{\pm}$ konstant, d.h. Pole (mit Vorzeichenwechsel!) liefern praktisch keine Beiträge. Die Dispersionsrelation ist jedoch dann erfüllbar, wenn (bei gegebenem $\vec{q}$) $|\omega_q|$ geringfügig größer ist als der maximale Wert, den die Differenzfunktion

$$\tilde{\omega}(q, k, x) \equiv |E_{-} - E_{+}| \quad (8.7)$$

bzgl. aller k und x annehmen kann. Es genügt die Existenz eines relativen Maximums. Zur Veranschaulichung dieser Überlegungen sind ein typisches Quasiteilchenspektrum E_k und die Differenzfunktion $|E_{-} - E_{+}|$ für $\cos \theta = 1$ in Abb.13 und 14 dargestellt.

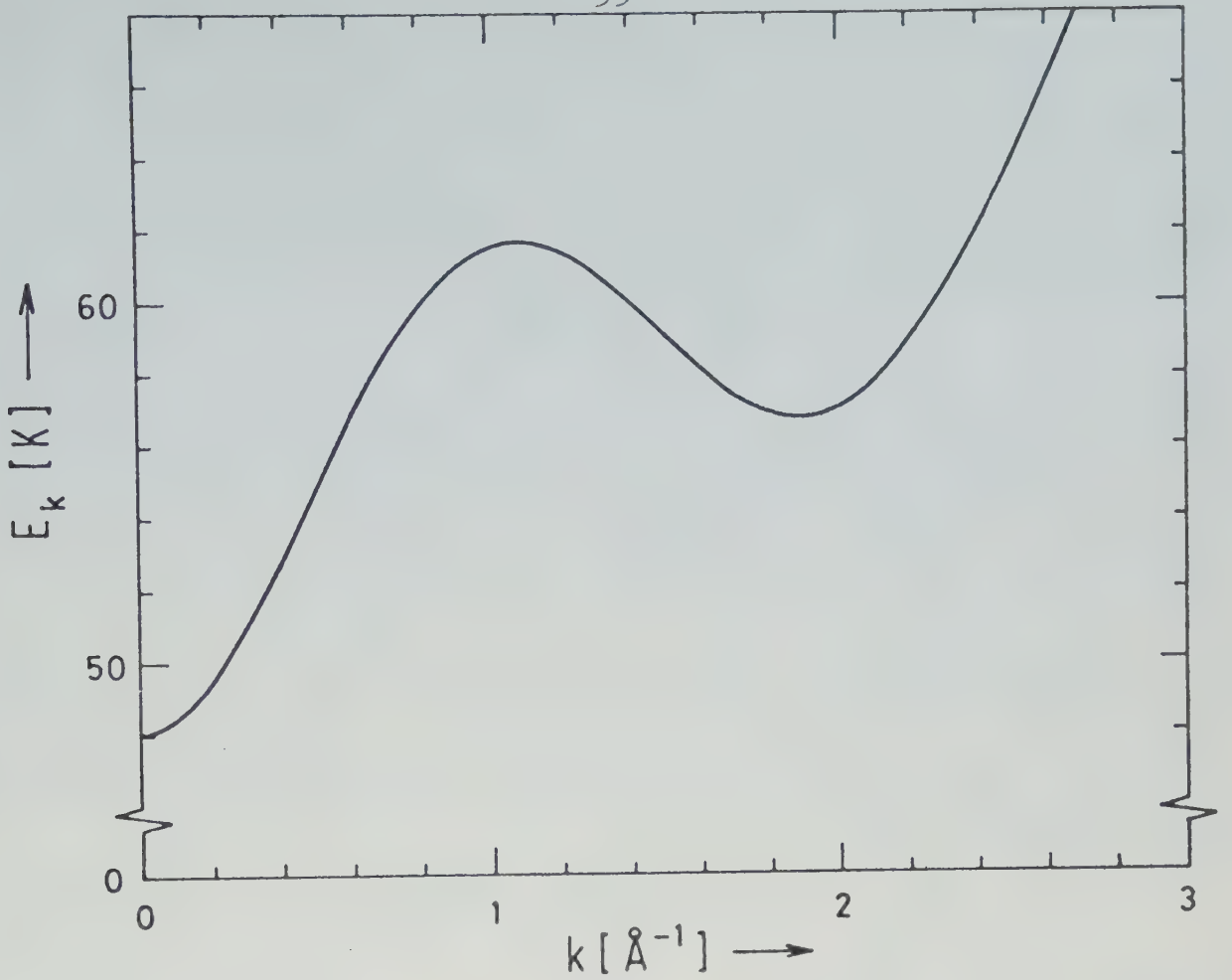
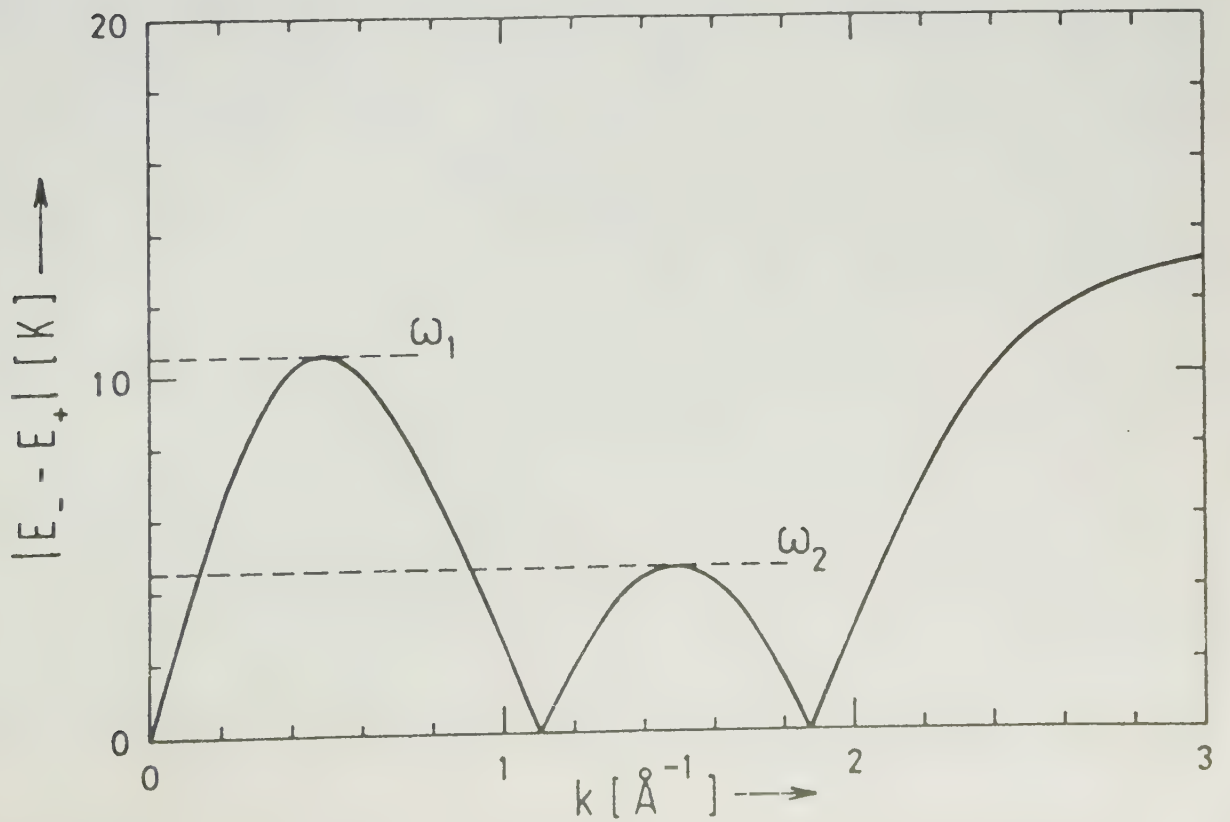


Abb. 13: Quasiteilchenspektrum E_k der Kondensat-Theorie.
(Potential- und Lösungsparameter s. Gl. (3.10) und Tab. I)

Abb. 14: Energiedifferenz $\tilde{\omega}(k, q, x) = |E_- - E_+|$ für $x = 1$
und $q = 0.6 \text{ Å}^{-1}$.



Wegen der Form von T_2^+ für gegebenes q vereinfacht sich die Berechnung der Anregungsenergien ω_q . Statt die Integration über alle k und $x = \cos \theta$ durchzuführen, suchen wir die Maxima der Differenzfunktion bzgl. k und x auf und gewinnen damit die von den niedrigsten ungedämpften Anregungen zu erfüllende Gleichung

$$\omega_q = \max_{k,x} |E_- - E_+|. \quad (8.8)$$

Diese Bedingung hat den Charakter einer Auswahlregel für die resonanten Übergänge. Für hinreichend kleine Temperaturen liegt der wahre Wert von ω_q beliebig dicht bei der so bestimmten Anregungsenergie. (Für $T \equiv 0$ verschwinden die Besetzungszahlen und damit T_2^+).

8.2 Ergebnisse für das Anregungsspektrum

Das von uns gewählte Modellpotential (2 δ -Schalen im Ortsraum mit Gewicht V_i und Abstand a_i)

$$W_q = \sum_i V_i \sin(ka_i)/(ka_i) \quad (8.9)$$

liefert mit den Parametern

$$\begin{aligned} V_1/a_1 &= 1560 \text{ K } \text{\AA}^2, & a_1 &= 1.2 \text{ \AA}, \\ V_2/a_2 &= -190 \text{ K } \text{\AA}^2, & a_2 &= 3.9 \text{ \AA} \end{aligned} \quad (8.10)$$

das in Abb.15 dargestellte Anregungsspektrum für $T \approx 0$ und Druck $p \approx 5 \text{ atm}$. Zum Vergleich sind die Werte von Cowley und Woods²⁸⁾ bei $T = 1.1 \text{ K}$ und Sättigungsdampfdruck eingezeichnet, die durch Streuung langsamer Neutronen gewonnen werden. Es zeigt sich, daß bei der durch die HF-Approximation gegebenen Form des Quasiteilchenspektrums E_k zwei relative Maxima und damit zwei niedrig liegende Anregungen existieren. Der obere Ast $\omega_1(q)$ läßt sich mit der bekannten "Phonon-Roton"-Form des He II-Spektrums identifizieren. Der untere Ast $\omega_2(q)$ weist zunächst einen phononenartigen linearen Teil auf und ist für $q > 0.8 \text{ \AA}^{-1}$ praktisch konstant.

Ehe wir im einzelnen daran gehen, weitere Eigenschaften der Spektren $\omega_1(q)$ und $\omega_2(q)$ zu untersuchen, wollen wir ein geeignetes Bild zu ihrer Beschreibung einführen. Offenbar sind die Anregungsenergien Übergängen zwischen kontinuierlichen Quasiteilchenniveaus zugeordnet. Es bietet sich daher eine Art "Bändermodell" an (wobei man sich darüber im klaren sein muß, daß man die Analogie mit Vorsicht zu ver-

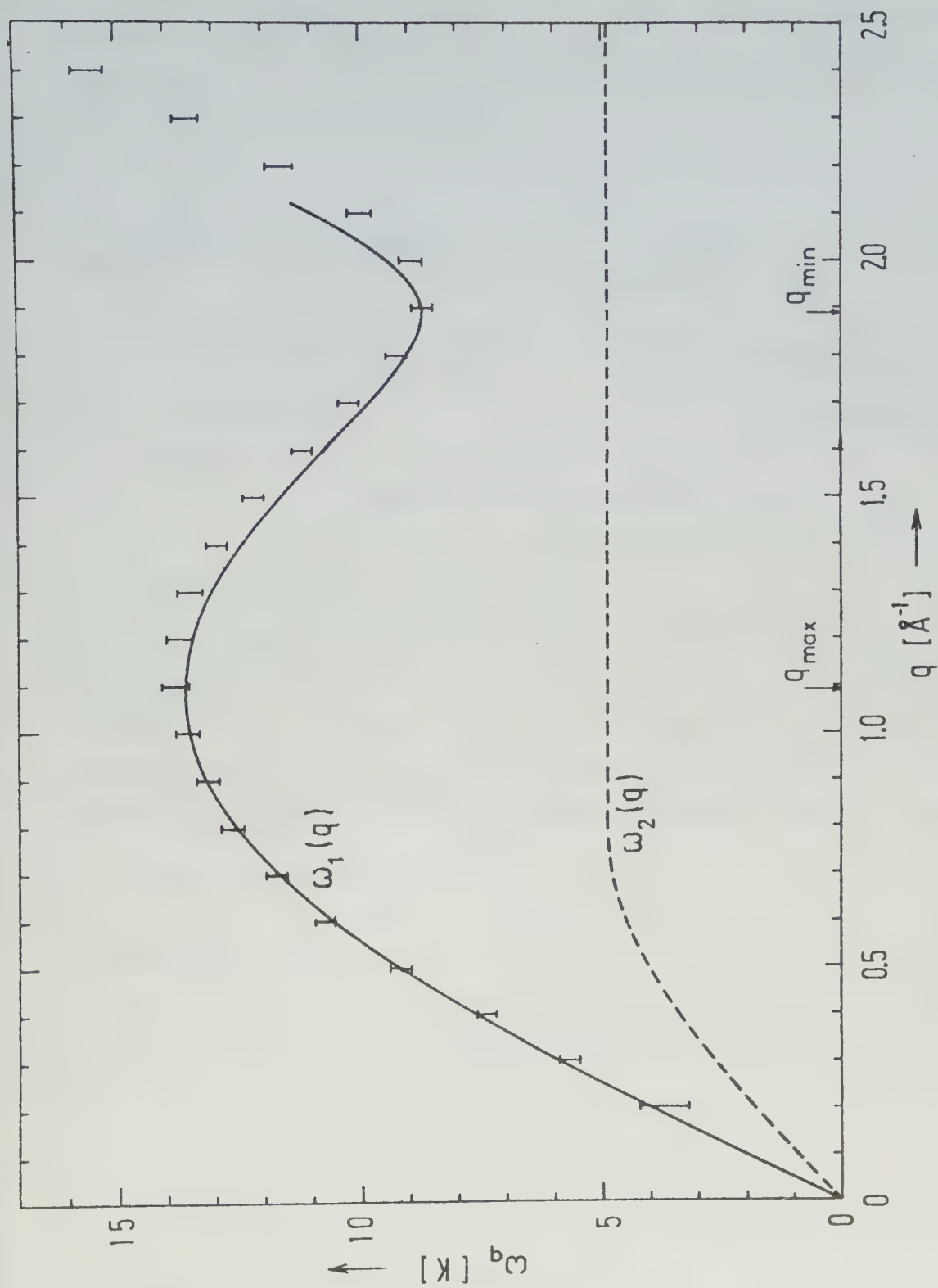
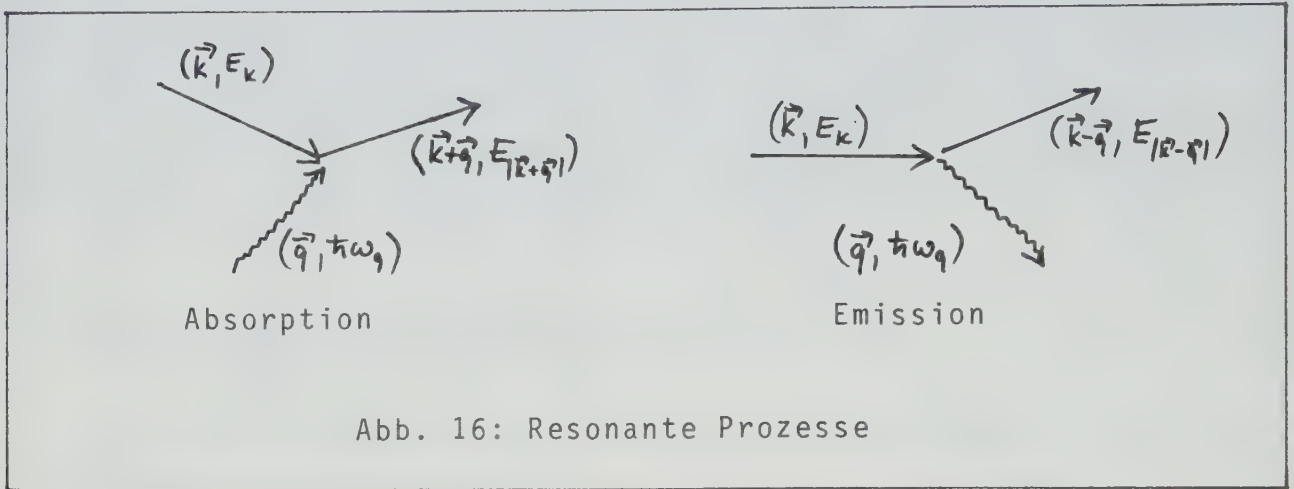


Abb. 15: Anregungsspektrum $\omega_q = \max_{\mathbf{k}} |E_- - E_+|$ für $T \gtrsim 0$ zum Quasiteilchenspektrum $E_{\mathbf{k}}$ (Abb. 13). Erläuterung der beiden Zweige s. Text.

wenden hat: so existiert im Bose-System z.B. keine Fermi-Energie): die niedrigen Anregungen kommen durch Emission und Absorption von "Phononen" (s. Abb. 16) innerhalb des Quasiteilchenbandes (Analogon zum Leitungsband) zustande, sind also Intrabandübergänge (wir wollen mit "Phononen" auch die Anregungsquanten bezeichnen, die vom "Maxonen"-Teil (relatives Maximum) und vom Rotonenteil von $\omega_1(q)$ herühren).



Die Erzeugung und Vernichtung von Quasiteilchen können wir dann als Interbandübergänge (Übergang vom Kondensat, dem Valenzband-Analogon, ins Quasiteilchenband) interpretieren. Der (minimale) Bandabstand ist im Grenzfall $k \rightarrow 0$ durch die "Energielücke" $E_{k \rightarrow 0}$ gegeben, die nicht mit der Energie des Kondensat"bandes" verwechselt werden darf, das nur aus dem diskreten Niveau $E_0 = 0$ besteht (Kondensat in Ruhe).

Tab. I: Eigenschaften des Anregungsspektrums

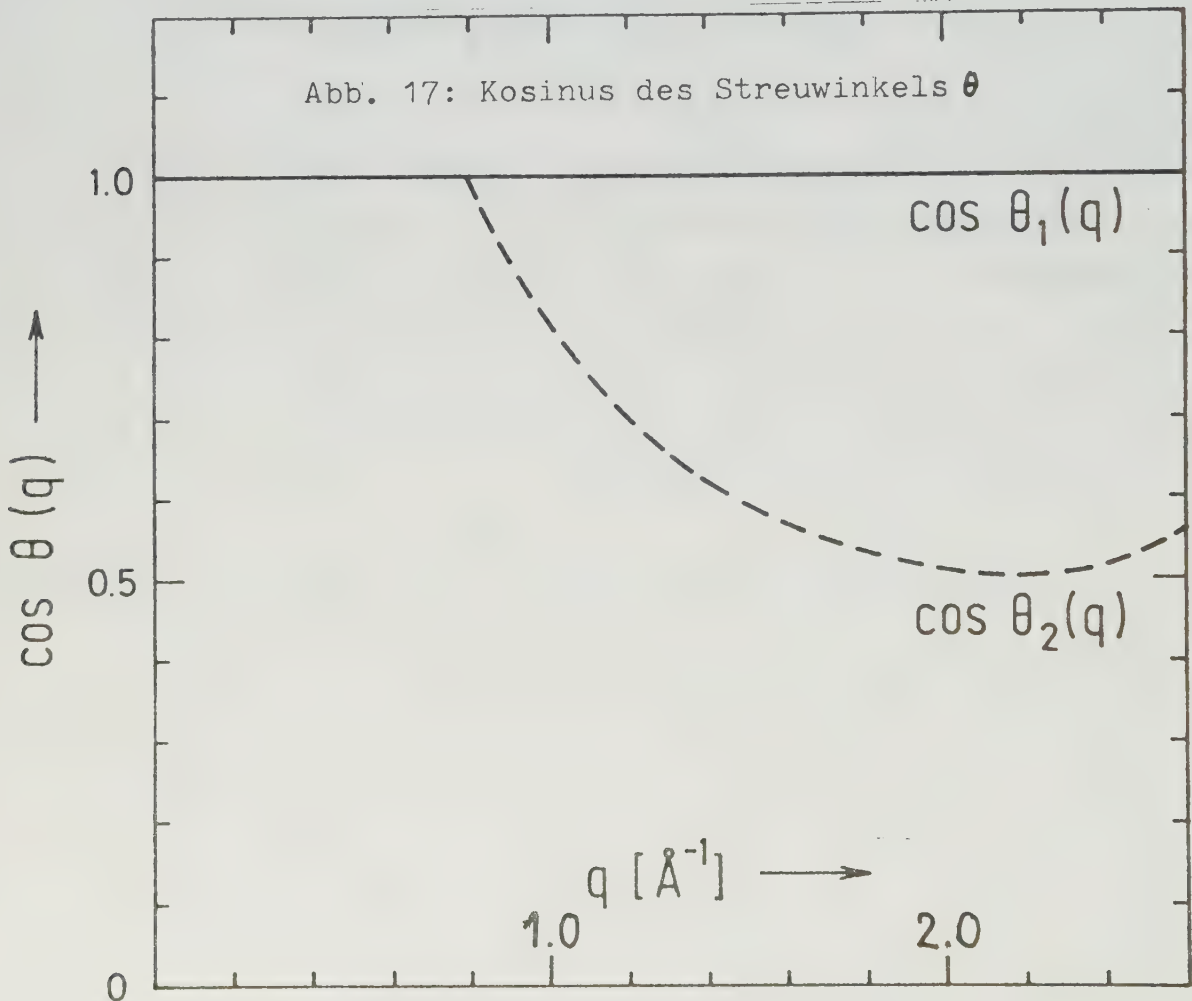
Eigenschaft/Größe	Theorie ($T \geq 0$ K)	Experiment [*] ($T = 1.1$ K)
1. <u>Phonon-Roton-Zweig</u> $\omega_1(q)$		
Schallgeschwindigkeit v_s	264 m/s	273 m/s ^{**}
relatives Maximum $\omega_{\max}$ bei $q_{\max}$	13.63 K 1.09 Å ⁻¹	13.8 ± 0.3 K 1.1 Å ⁻¹
Rotonenminimum Δ bei $q_{\min}$	8.74 K 1.89 Å ⁻¹	8.7 ± 0.2 K 1.9 Å ⁻¹
Rotonenmasse m_r	0.13 m_{He}	0.15 m_{He}
Endpunkt ω bei q v	11.41 K 2.12 Å ⁻¹ 250 m/s	
2. <u>unterer Zweig</u> $\omega_2(q)$		
Schallgeschwindigkeit v_s	123 m/s	
Maximum $\omega_{\max}$ bei $q_{\max}$	4.90 K 0.79 Å ⁻¹	
Schwelle für Streuung unter endlichen Winkeln	0.79 Å ⁻¹	
Maximaler Streuwinkel θ bei q	60 ° 2.2 Å ⁻¹	
<u>Lösungs- und Potentialparameter</u> der zugrundeliegenden selbstkonsistenten Einteilchentheorie bei $T = 0$: $V_1/a_1 = 1560 \text{ K Å}^2$, $a_1 = 1.2 \text{ Å}$, $V_2/a_2 = -190 \text{ K Å}^2$, $a_2 = 3.9 \text{ Å}$ Kondensatanteil $c_0 = 94.72 \%$ Selbstenergie $\xi_1 = 0.863 \text{ K}$, $\xi_2 = 0.0477 \text{ K}$ Kohärenzparameter $\Delta_1 = 15.426 \text{ K}$, $\Delta_2 = -16.345 \text{ K}$		
[*] nach Cowley und Woods 28) ^{**} nach Lit. 29 auf $p = 5 \text{ atm}$ und $T = 0$ extrapoliert		

8.3 Eigenschaften des Spektrums

In Tab.I werden unsere Ergebnisse den experimentellen Ergebnissen gegenübergestellt.

Aus der numerischen Berechnung des oberen Zweiges $\omega_1(q)$ geht hervor, daß die Maxima der Differenzfunktion $\tilde{\omega}(k,q,x)$ stets bei $x = \cos \theta = \pm 1$ liegen, (vgl. Abb.17), d.h. die Impulse von "Phonon" und Quasiteilchen sind kollinear. Mit anderen Worten: auf dem "Phonon-Roton"-Zweig sind keine Rotationsanregungen möglich.

Anders sieht es dagegen auf dem unteren Zweig aus. Für $q \geq 0.79 \text{ \AA}^{-1}$ sind die Impulse von ein- und auslaufenden Quasiteilchen und "Phonon" nicht mehr kollinear; dies gilt für diejenigen Prozesse, die zu $\omega_2(q)$ resonant beitragen (s. Abb.17).



Die bevorzugten Streuwinkel θ wandern bei größeren q bis zu einem maximalen Winkel von 60° bei $q \approx 2.2 \text{ \AA}^{-1}$ und werden dann wieder kleiner. Für endliche Streuwinkel besteht also für die Quasiteilchen die prinzipielle Möglichkeit, eine geschlossene Bahn zu

durchlaufen. Es ist jedoch nicht klar, ob dieses Ergebnis dazu geeignet ist, die Rotationsanregungen in He II zu beschreiben, da in unsere mikroskopische Theorie an keiner Stelle die Existenz von Rotationsanregungen hineingesteckt wurde.

Der untere Zweig des Spektrums erstreckt sich bis $q \approx 2.5 \text{ \AA}^{-1}$ (dort wird $W_q < 0$, und damit ist Glg. (8.8) nicht mehr anwendbar). Dagegen existiert für den oberen Zweig ein definierter Endpunkt bei $q \approx 2.12 \text{ \AA}^{-1}$; für größere q -Werte existiert hier kein relatives Maximum mehr. Nach Pitaevski³⁰⁾ findet bei größerem q ein Zerfall der Anregungen in Paare von Anregungen statt, falls entweder die Phasengeschwindigkeit der Anregungen jene im Phononenteil überschreitet, oder aber wenn die Energie der Anregungen größer als 2Δ ist. Ein Vergleich mit unseren theoretischen Ergebnissen (s. Tab.I) zeigt, daß das erste Kriterium recht gut erfüllt ist, das zweite nicht.

Bekanntlich ist der Imaginärteil der retardierten Dichte-Korrelationsfunktion (bzw. der dynamischen Suszeptibilität χ_{nn} Glg.(6.31)) mit der mittleren Energieabsorption $\bar{W}$ verknüpft (Dissipations-Fluktuations-Theorem), d.h.

$$\bar{W} \sim \omega \operatorname{Im} D^R(\vec{q}, \omega). \quad (8.11)$$

Diese Beziehung gestattet uns, die Energieaufnahme der beiden Zweige $\omega_1(q)$ und $\omega_2(q)$ aus dem äußeren Störfeld abzuschätzen. Uns interessiert dabei besonders das Verhältnis der Stärken, mit denen die beiden Zweige an das äußere Feld ankoppeln. Der Imaginärteil von Glg.(7.20) berechnet sich mit Hilfe der Dirac-Identität Glg.(6.11) zu

$$i \operatorname{Im} D^R(\vec{q}, \omega_q) \simeq -\frac{i\pi}{4} \sum_{\vec{r}} (\bar{n}_- - \bar{n}_+) \left(\frac{\tilde{\epsilon}_+ \tilde{\epsilon}_- + \Delta_+ \Delta_-}{E_+ E_-} + 1 \right) \cdot \left\{ \delta(\omega_q - [\epsilon_- - \epsilon_+]) - \delta(\omega_q + [\epsilon_- - \epsilon_+]) \right\}, \quad (8.12)$$

wobei wir alle Beiträge von T_1^+ und T_3^+ vernachlässigen können, da die Anregungsenergien $\omega_q = \omega_1(q)$ und $\omega_q = \omega_2(q)$ stets sehr viel kleiner sind als die Quasiteilchenenergien E_q bzw. $E_- + E_+$. Für positive ω_q (der Imaginärteil ist eine ungerade Funktion in ω_q) erhalten wir (den Faktor mit $\tilde{\epsilon}_+$ usw. schätzen wir mit ≈ 2 ab)

$$\text{Im } D^R(\vec{q}, \omega_q) \simeq -\frac{\pi}{2} \sum_{\vec{k}} \left\{ \begin{array}{ll} (\bar{n}_- - \bar{n}_+) \{ -\delta(\omega_q + [E_- - E_+]) \}, & E_+ > E_- \\ -(\bar{n}_+ - \bar{n}_-) \delta(\omega_q - [E_- - E_+]), & E_- > E_+ \end{array} \right\}$$

$$\simeq \frac{\pi}{2} \sum |\bar{n}_+ - \bar{n}_-| \delta(\omega_q - |E_- - E_+|). \quad (8.13)$$

Die δ -Funktion sorgt dafür, daß von der Summe über $\vec{k}$ nur jene "resonanten" Vektoren beitragen, für die die "Auswahlregel" Glg.(8.8) erfüllt ist. In Abb.18 sind zu gegebenem q diejenigen "mittleren" k_i und $k_{i\pm} \equiv |k_i^2 + q^2/4 \pm k_i q_x|$ dargestellt, für die das der Fall ist ($i = 1$ oberer, $i = 2$ unterer Zweig des Anregungsspektrums). Wenn wir uns weiterhin auf $q \lesssim 0.8 \text{ \AA}^{-1}$ beschränken, so ist die Dispersionsrelation (8.8) für beide Zweige winkelunabhängig und wir erhalten für das Verhältnis $\bar{W}_1/\bar{W}_2$ der Energieabsorptionen auf den beiden Zweigen

$$\frac{\bar{W}_1}{\bar{W}_2} \simeq \frac{\omega_1(q)}{\omega_2(q)} \frac{k_1^2}{k_2^2} \frac{|\bar{n}_+ - \bar{n}_-|_{k=k_1(q)}}{|\bar{n}_+ - \bar{n}_-|_{k=k_2(q)}}. \quad (8.14)$$

Für $q \lesssim 0.8 \text{ \AA}^{-1}$ entnehmen wir z.B. die folgenden k -Werte aus Abb.18 und die dazugehörigen Quasiteilchenenergien $E_{i\pm} = E(k_{i\pm})$ aus Abb.19:

<u>oberer Zweig</u> $k_1 \approx 0.5 \text{ \AA}^{-1}$	$k_{1+} \approx 0.9 \text{ \AA}^{-1}$	$k_{1-} \approx 0.1 \text{ \AA}^{-1}$
	$E_{1+} \approx 61 \text{ K}$	$E_{1-} \approx 48.5 \text{ K}$
	$\omega_1(q) = 12.5 \text{ K}$	
<u>unterer Zweig</u> $k_2 \approx 1.5 \text{ \AA}^{-1}$	$k_{2+} \approx 1.9 \text{ \AA}^{-1}$	$k_{2-} \approx 1.1 \text{ \AA}^{-1}$
	$E_{2+} \approx 57 \text{ K}$	$E_{2-} \approx 62 \text{ K}$
	$\omega_2(q) = 5 \text{ K}$	

Wegen der großen "Lücke" $E_{k \rightarrow 0} \approx 48 \text{ K}$ können wir die Besetzungszahlen durch Boltzmannfaktoren $\exp(-\beta E_{i\pm})$ approximieren und überall $\exp(-\beta E_{k \rightarrow 0})$ ausklammern. Dann ergibt sich z.B. für $T = 1 \text{ K}$

$$\frac{\bar{\dot{W}}_1}{\bar{\dot{W}}_2} \approx \frac{12.5}{5} \left(\frac{0.5}{1.5} \right)^2 \frac{e^{-0.5} - e^{-13}}{e^{-9} - e^{-14}} \approx e^{+8.5} \approx \frac{10^3}{1}. \quad (8.16)$$

Der untere Zweig absorbiert also relativ viel weniger Energie aus dem äußeren Störfeld als der "Phonon-Roton"-Zweig.

9. Supraflüssigkeiten und Supraleiter in äußeren Feldern

Zum besseren Verständnis der suprafluiden Dichte ρ_s wollen wir in diesem Kapitel einige Gemeinsamkeiten von Supraleitern und Supraflüssigkeiten darstellen. Im phänomenologischen Zwei-Flüssigkeits-Modell läßt sich ρ_s zunächst zwanglos einführen. Es soll dann ein idealisiertes Experiment angegeben werden, durch das ρ_s gemessen werden kann. Schließlich soll noch die enge Analogie zwischen einem Typ II-Supraleiter im konstanten Magnetfeld $\vec{H}$ und einer Supraflüssigkeit, die sich in einem gleichförmig rotierenden Gefäß befindet, herausgearbeitet werden.

9.1 Zwei-Flüssigkeits-Modell

Dieses Modell geht auf F. London und L. Tisza und - unabhängig davon - auf L. Landau zurück. Danach besteht die kohärente Phase des Systems aus zwei innig vermischten Komponenten mit den Dichten ρ_s und ρ_n mit $\rho_s + \rho_n = \rho$. ρ_s ist die Dichte des suprafluiden Anteils, ρ_n die der Anregungen aus dem suprafluiden "Hintergrund" ³¹⁾. Für $T \rightarrow 0$ geht $\rho_s/\rho \rightarrow 1$, für $T \rightarrow T_c$ (kritische Temperatur) geht $\rho_s/\rho \rightarrow 0$.

Die beiden Flüssigkeiten können mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten $\vec{v}_n(\vec{r})$ und $\vec{v}_s(\vec{r})$ strömen. Die Bewegung der supraflüssigen Komponente ist wirbelfrei, d.h. $\text{rot } \vec{v}_s = 0$, wie zuerst von Landau postuliert wurde. Die normale Komponente enthält die gesamte Entropie des Systems und verhält sich wie eine gewöhnliche viskose Flüssigkeit.

In einfach zusammenhängenden Gebieten gilt der Satz von Stokes

$$\int \text{rot } \vec{v}_s \cdot d\vec{l} = \oint \vec{v}_s \cdot d\vec{l}, \quad (9.1)$$

d.h. die Zirkulation der Supraflüssigkeit längs jeder geschlossenen Kurve muß verschwinden. Existiert daher in dieser Komponente eine nichtverschwindende Zirkulation, so deutet das auf das Auftreten von Wirbellinien (Vortices) hin - sofern die Geometrie des Gefäßes ein einfach zusammenhängendes Flüssigkeitsvolumen zuläßt. Die Zirkulation um diese Singularitäten des Geschwindigkeitsfeldes ist quantisiert.

siert; freie quantisierte Vortices stellen somit die einzige Möglichkeit für die Supraflüssigkeit dar, in einem einfach zusammenhängenden Volumen zu rotieren. Es existiert ferner zwischen der normalen Komponente und dem Kern (core) der Wirbellinie eine Wechselwirkung, die durch den klassischen Magnus-Effekt zustande kommt. Allein über diese Wechselwirkung können die beiden Flüssigkeiten aufeinander Kräfte ausüben.

9.2 Idealisiertes Rotationsexperiment für Supraflüssigkeiten

Eine Stoffmenge Helium II ($T < T_c$) befinde sich in einem zylindrischen Gefäß, dieses rotiere um seine Symmetrieachse mit konstanter (von Experiment zu Experiment variabler) Winkelgeschwindigkeit $\vec{\Omega}$. Durch die Rotation wird der Gleichgewichtszustand des Systems, bei dem die freie Energie F minimal ist, gestört. Es stellt sich ein neues Gleichgewicht ein, bei dem das Potential

$$F' = F - \vec{L} \cdot \vec{\Omega} \quad (9.2)$$

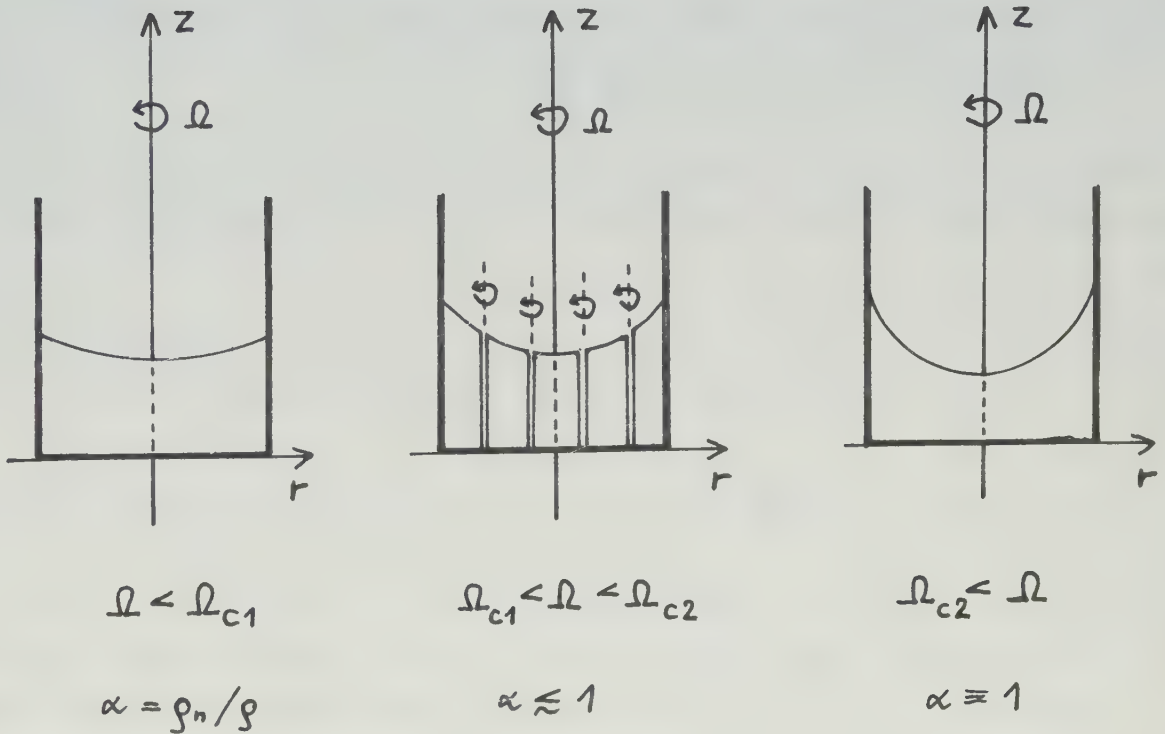
($\vec{L}$ Drehimpuls des Systems) im Minimum ist. Solange $|\vec{\Omega}|$ klein genug ist, so daß keine Wirbellinien (zu deren Erzeugung eine Mindestenergie erforderlich ist) auftreten können, gilt $\text{rot } \vec{v}_s = 0$ an allen Punkten bzw. $\int \vec{v}_s \cdot d\vec{x} = 0$ längs jedes geschlossenen Weges in der Flüssigkeit, was gleichbedeutend mit $\vec{v}_s \equiv 0$ ist: die supraflüssige Komponente verbleibt (in Bezug auf einen äußeren Beobachter) in Ruhe. Dies ist jedoch nicht länger der Fall, wenn nach Überschreiten einer kritischen Winkelgeschwindigkeit Ω_{c1} eine einzelne Wirbellinie (mit Drehimpuls $\vec{L} \sim$ Zirkulation $\vec{K}$) gebildet werden kann. Es stellt sich dann der neue Gleichgewichtszustand ein. Für wachsendes Ω können weitere Wirbel gebildet werden (offenbar ist die Erzeugung zweier Wirbellinien mit je einem Elementarquant an Zirkulation energetisch günstiger als die Bildung eines Wirbels mit doppelter Elementarzirkulation), bis schließlich für $\Omega \gg \Omega_{c1}$ ein uniformes Gitter von Wirbellinien auftritt. Diese Anordnung von Wirbellinien rotiert dann praktisch wie eine homogene normale Flüssigkeit. Oberhalb einer zweiten kritischen Winkelgeschwindigkeit Ω_{c2} wird es für das System energetisch günstiger, die gesamte supraflüssige Komponente in normale Flüssigkeit umzubilden und auf diese Weise Rotationsenergie aufzunehmen. Dies tritt etwa dann ein, wenn die Kerne der Wirbellinien anfangen, sich zu überlagern.

In allen drei Bereichen beobachtet man (auf einer makroskopischen Beobachtungsskala) eine parabolische Flüssigkeitsoberfläche (s. Abb.20), die durch die Gleichung

$$z = \alpha (\Omega r)^2 / (2g) \quad (g \text{ Fallbeschleunigung}) \quad (9.3)$$

gegeben ist. Die Steighöhe z ist jedoch in dem Ausmaß reduziert, in dem die Supraflüssigkeit wirbellinienfrei ist. Experimentell beobachtet man Abweichungen von $\alpha = 1$ nur bei sehr geringen Winkelgeschwindigkeiten ³²⁾.

Abb. 20



9.3 Analogie zum Supraleiter

Im Supraleiter kann die supraleitende Elektronen-"Flüssigkeit" ohne Schwierigkeiten einer Rotation des Gitters folgen. Das analoge Problem beim Supraleiter bezieht sich daher nicht auf Rotationsbewegungen, sondern auf die Existenz des vollständigen und unvollständigen Meißner-Effektes beim Typ II-Supraleiter. Ein Stoff aus dieser Materialklasse zeigt unterhalb T_c bei Anlegen eines schwachen konstanten äußeren Magnetfeldes $H < H_{c1}$ den vollständigen Meißner-Effekt (perfekter Diamagnetismus): das äußere Feld wird aus seinem Innern durch ein induziertes gleichgroßes Gegenfeld vollständig verdrängt (es sei vorausgesetzt, daß die - endliche - Eindringtiefe λ sehr klein sei gegenüber den Dimensionen des Supraleiters). Bei $H = H_{c1}$ ist es energetisch möglich, Flußlinien zu erzeugen; es stellt sich dann der "mixed superconducting state" als neuer Gleichgewichtszustand ein, bei dem das Gibbs'sche Potential

$$F' = F - \vec{m} \cdot \vec{H} \quad (9.4)$$

($\vec{m}$ Magnetisierung des Systems) im Minimum ist. Die Magnetisierung steigt mit der Zahl der Flußlinien, die je ein Flußquantum ϕ_0 haben.

Oberhalb eines kritischen Feldes H_{c2} liegen die Flußlinien so dicht, daß sie sich zu überlappen beginnen; das Material geht in den Normalzustand über.

In Abb.21 sind die beiden analogen Verhaltensweisen graphisch gegenübergestellt. Ehe wir uns diese Analogie für die Berechnung der suprafluiden Dichte ρ_s zunutze machen, soll noch auf die Grenzen dieses Vergleichs hingewiesen werden. Bei den Supraleitern definiert die Existenz von $H_{c1} < H_{c2}$ die Typ II-Materialien; bei Typ I-Supraleitern gibt es andere Strukturen ("intermediate state" mit normalen und supraleitenden Bereichen); eine Supraflüssigkeit wie Helium II entspricht dagegen einem extremen Typ II-Supraleiter. Weiterhin muß festgestellt werden, daß das äußere Geschwindigkeitsfeld $\vec{\Omega}$ überhaupt nicht durch die auftretenden Teilchenströme modifiziert wird, Helium daher eine unendlich große Eindringtiefe λ aufweist, während im Supraleiter sehr wohl die Ströme auf die Felder zurückwirken. (Auf die Unterschiede zwischen geladenen und neutralen Systemen sowie den Einfluß von Gitterstruktur und Störstellen können wir hier nicht eingehen).

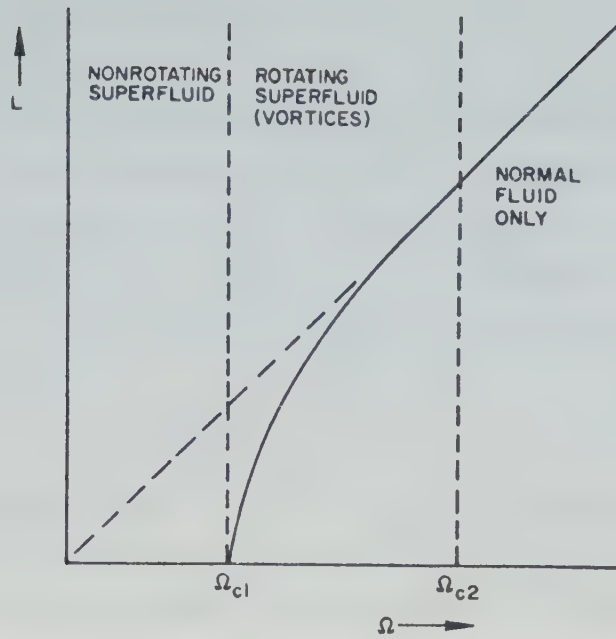


Abb. 21a: Drehimpuls L des supraflüssigen He II als Funktion der Winkelgeschwindigkeit Ω des rotierenden Gefäßes (schematisch, nach ³³⁾)

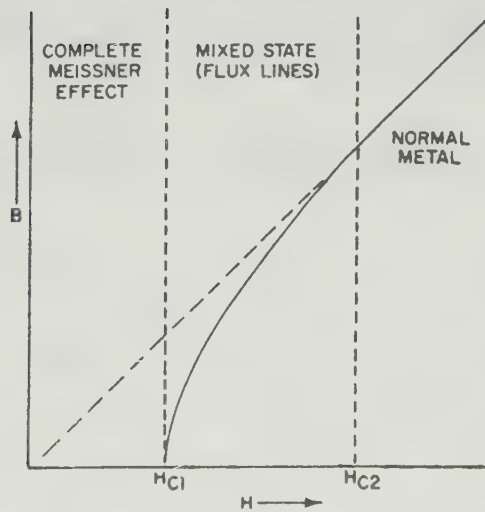


Abb. 21b: Magnetische Induktion B eines Typ II-Supra-
leiters als Funktion des angelegten Feldes H
(ebenfalls schematisch nach Lit. 33).

Zur Berechnung der suprafluiden Dichte machen wir von der Analogie in folgender quantitativer Form Gebrauch. Wir stören das Gleichgewicht durch ein schwaches äußeres Feld, so daß sich noch keine Vortices oder Flußlinien bilden können. Der Impuls $\vec{p}$ des ungestörten Systems geht dann über in $\vec{p}'$, der relativ zum "Feldimpuls" gemessen wird

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p}' - m \vec{\mathcal{V}} \times \vec{r} \quad \vec{p} \rightarrow \vec{p}' - \left(\frac{e}{c}\right) \vec{A} \quad (9.5)$$

d.h. relativ zum mitbewegten Bezugssystem (bzw. zum Impuls des elektromagnetischen Feldes mit Vektorpotential $\vec{A}$, Ladung $-e$, Lichtgeschwindigkeit c). Es ist daher notwendig, die Supraflüssigkeit vom mitbewegten Bezugssystem aus zu betrachten: dann wird durch das äußere Geschwindigkeitsfeld $\vec{v}_{\text{ext}}$ bzw. $\vec{\mathcal{V}}$ ein "Gegenstrom" gleicher Größe induziert (analoger Meißner-Effekt). Die Übersetzungsregeln zu dieser Analogie sind in Tabelle II zusammengestellt.

$\text{div } \vec{H} = 0$ $\vec{H} = \text{const.}$ $\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \vec{H} \times \vec{r}$ $\vec{H} = \text{rot } \vec{A}(\vec{r})$ $\vec{p} \rightarrow \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}$ $-\frac{e}{c}$ $\vec{A}$	$\text{div } \vec{\mathcal{V}} = 0$ $\vec{\mathcal{V}} = \text{const.}$ $\frac{1}{2} \vec{v}_{\text{ext}}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \vec{\mathcal{V}} \times \vec{r}$ $\vec{\mathcal{V}} = \text{rot } \frac{1}{2} \vec{v}_{\text{ext}}(\vec{r})$ $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - m \vec{v}_{\text{ext}} = \vec{p} - m \vec{\mathcal{V}} \times \vec{r}$ $2m$ $\frac{1}{2} \vec{v}_{\text{ext}}$
Elektrodynamik	Mechanik

Tab. II "Übersetzungsregeln"

10. Strom-Korrelationsfunktion und suprafluide Dichte

Zur Berechnung der suprafluiden Dichte müssen wir uns zunächst die retardierte Strom-(Strom-)Korrelationsfunktion beschaffen. Dazu werten wir die lineare Antwort des Stromes auf eine Störung aus, die (über ein Vektorpotential) an einen Teilchen- oder Ladungsstrom an-koppelt. Da solche Rechnungen für supraleitende Fermi-Systeme schon durchgeführt wurden (s. etwa Fetter/Walecka²⁷⁾ oder Schrieffer³⁴⁾) wollen wir unsere Ableitung im vertrauten "elektromagnetischen Bild" durchführen und erst zum Schluß mit Hilfe der Übersetzungsregeln Tab.II auf die gleichförmige Rotation umsteigen.

10.1 Stromoperator in Anwesenheit eines äußeren Feldes

Der Hamilton-Operator für ein System geladener Teilchen (hier Elektronen mit Ladung $-e$) in einem äußeren elektromagnetischen Feld ist bekanntlich ($\vec{A}(\vec{r}, t)$ = Vektorpotential)

$$H_{\text{tot}} = \int d^3r \psi^\dagger(\vec{r}) \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \psi(\vec{r}) + H_{\text{int}}. \quad (10.1)$$

Für $\vec{A} = 0$ erhalten wir den Hamilton-Operator des ungestörten wechselwirkenden Systems; daher wird die Störung beschrieben durch

$$\begin{aligned} H_A &= \int d^3r \psi^\dagger \frac{1}{2m} \left[\frac{e\hbar}{ci} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{\nabla}) + \frac{e^2}{c^2} A^2 \right] \psi \\ &= \int d^3r \left\{ \frac{e\hbar}{2mci} [\psi^\dagger (\vec{\nabla} \psi) - (\vec{\nabla} \psi^\dagger) \cdot \psi] \cdot \vec{A} + \frac{e^2}{2mc^2} A^2 \psi^\dagger \psi + \frac{e\hbar}{2mci} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) \psi^\dagger \psi \right\}. \end{aligned} \quad (10.2)$$

Wegen des adiabatischen Einschaltens müssen wir noch einen Faktor $e^{\epsilon t}$ einfügen, den wir jedoch hier und im folgenden unterdrücken.

Wir wollen uns im folgenden auf ein transversales Feld (reines Wirbelfeld) beschränken, d.h. für die Fouriertransformierte des Vektorpotentials

$$\vec{A}(\vec{q}, \omega) = \int d^3r \int dt \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{r} + i\omega t) \vec{A}(\vec{r}, t) \quad (10.3)$$

gelte wegen der Transversalität ($\vec{q} \perp \vec{A} \perp$)

$$\vec{q} \cdot \vec{A}(\vec{q}, \omega) = 0 \quad (\text{bzw.} \quad \text{div } \vec{A}(\vec{r}, t) = 0.) \quad (10.4)$$

Ein transversales Feld ist automatisch eichinvariant: nach der Maxwell-Gleichung $\text{div } \vec{B} = 0$ ist $\vec{A}$ stets nur bis auf Gradiententerme bestimmt ($\text{rot grad} \equiv 0$). Eine allgemeine Eichtransformation hat daher die Form

$$\vec{A}'(\vec{r}t) = \vec{A}(\vec{r}t) + \vec{\nabla} \phi(\vec{r}t) \quad (10.5)$$

bzw.
$$\vec{A}'(\vec{q}\omega) = \vec{A}(\vec{q}\omega) + i\vec{q} \phi(\vec{q}\omega)$$

mit skalarem Feld ϕ und betrifft somit nur die longitudinale Komponente $\vec{A}_{||}(\vec{q}\omega) \parallel \vec{q}$!

Ein transversales Vektorpotential erfüllt die Coulombeichung (bei Supraleitern auch als London-Eichung bezeichnet) $\text{div } \vec{A} = 0$, d.h. der letzte Term in Glg.(10.2) verschwindet.

Wir erinnern uns nun daran, daß der Operator des (elektrischen) Stromes in Abwesenheit äußerer Felder die Gestalt hat

$$\vec{j}_0(\vec{r}t) = -e \frac{\hbar}{2mi} [\psi^+ \nabla \psi - (\nabla \psi^+) \psi] \quad (10.6)$$

und die Kontinuitätsgleichung

$$-e \frac{\partial}{\partial t} n(\vec{r}t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_0(\vec{r}t) = 0 \quad (10.7)$$

erfüllt mit der Teilchendichte $n(\vec{r}t) = \psi^+(\vec{r}t)\psi(\vec{r}t)$ und der zeitlichen Änderung

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\vec{r}t) = \frac{i}{\hbar} [H, n(\vec{r}t)]. \quad (10.8)$$

Im gestörten System wird die zeitliche Änderung durch

$$H_{\text{tot}}(t) = H + H_A(t) = \int d^3r \psi^+ \frac{1}{2m} (m\vec{v})^2 \psi + H_{\text{int}} \quad (10.9)$$

bestimmt. Dann erfüllt der Operator des totalen (elektrischen) Stromes mit der intuitiven Form

$$\vec{j}(\vec{r}t) = -\frac{e}{2} [\psi^+ \vec{v} \psi + (\vec{v} \psi)^+ \psi] \quad (10.10)$$

und

$$m\vec{v} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + \frac{e}{c} \vec{A} \quad (10.11)$$

die entsprechende Kontinuitätsgleichung mit modifizierter Berechnung der Zeitableitung. Einsetzen von (10.11) in (10.10) liefert die gesuchte Form

$$\begin{aligned}\vec{j}(\vec{r}t) &= -e \left\{ \frac{\hbar}{2mi} [\psi^\dagger \vec{\nabla} \psi - (\vec{\nabla} \psi^\dagger) \psi] + \frac{e}{mc} \vec{A} \psi^\dagger \psi \right\} \\ &= \vec{j}_0(\vec{r}t) - \frac{e^2}{mc} \vec{A}(\vec{r}t) n(\vec{r}).\end{aligned}\quad (10.12)$$

10.2 Lineare Antwort auf ein schwaches Wirbelfeld

In unserer durch H_t gegebenen Approximation ist die lineare Antwort eines Operators $\hat{O}$ auf die durch H_A vermittelte Störung gegeben durch (s. Glg.(5.12))

$$\langle \hat{O}(\vec{r}t) \rangle - \langle \hat{O}(\vec{r}) \rangle_t = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle [\hat{O}(\vec{r}t), H_A(t')] \rangle_t \quad (10.13)$$

Hier betrachten wir die Änderung des totalen Stromes

$$\delta \langle \vec{j}(\vec{r}t) \rangle \equiv \langle \vec{j}(\vec{r}t) \rangle - \langle \vec{j}(\vec{r}) \rangle_t. \quad (10.14)$$

Für die weitere Rechnung ist es sinnvoll, die Fouriertransformierte des Stromoperators zu berechnen. Eine ähnliche Rechnung haben wir bereits in Kapitel 5 durchgeführt.

Für den Strom $\vec{j}^0(\vec{q})$ erhalten wir

$$\begin{aligned}\vec{j}_0(\vec{q}) &= \int d^3r e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \left(\frac{-e\hbar}{2mi} \right) \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \vec{p}} \left\{ e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\nabla} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} - [\vec{\nabla} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}] e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} \right\} c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{p}} \\ &= \frac{1}{V} \left(\frac{-e\hbar}{2mi} \right) \sum (i\vec{p} + i\vec{k}) c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{p}} \int d^3r \exp[-i(\vec{k} - \vec{p} + \vec{q}) \cdot \vec{r}].\end{aligned}\quad (10.15)$$

Mit Glg.(5.16a) resultiert schließlich

$$\vec{j}_0(\vec{q}) = -e \frac{\hbar}{m} \sum_{\vec{k}} (\vec{k} + \vec{q}/2) c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}+\vec{q}}. \quad (10.16)$$

Damit folgt schließlich der Gesamtstrom

$$\vec{j}(\vec{q}) = \vec{j}_0(\vec{q}) - \frac{e^2}{mc} \int d^3r \exp(-i\vec{q}\cdot\vec{r}) \vec{A}(\vec{r}) n(\vec{r}) \quad (10.17)$$

Wir sehen sofort, daß bei fehlendem Feld der Erwartungswert von $\vec{j}_0(\vec{r})$ verschwindet, da alle seine Fourierkomponenten verschwinden:

$$\langle \vec{j}_0(\vec{q}) \rangle_t = -e \sum_{\vec{p}} \frac{\hbar}{m} (\vec{k} + \vec{q}/2) \langle c_{\vec{p}}^+ c_{\vec{p}} \rangle_t \delta_{\vec{q}0} = 0. \quad (10.18)$$

(der Integrand ist eine ungerade Funktion in $\vec{k}$).

Für die lineare Antwort (bis zur 1. Ordnung in $\vec{A}$!) gilt

$$\langle \vec{j}(\vec{r}t) \rangle = -\frac{e^2}{mc} \vec{A}(\vec{r}t) \langle n(\vec{r}t) \rangle_t - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle [\vec{j}(\vec{r}t), \tilde{H}_A(t')] \rangle_t, \quad (10.19)$$

$$\text{wobei} \quad \tilde{H}_A(t') = -\frac{1}{c} \int d^3r \vec{j}_0(\vec{r}t') \cdot \vec{A}(\vec{r}t') \quad (10.20)$$

die (wegen $\text{div } \vec{A} = 0$ eindeutige) Wechselwirkungsdarstellung der Störung ist. Einsetzen der beiden Komponenten des totalen Stroms nach Glg. (10.17) liefert schließlich unter Vernachlässigung von Termen $\sim A^2$

$$\begin{aligned} \langle \vec{j}(\vec{r}t) \rangle = & -\frac{e^2}{mc} \vec{A}(\vec{r}t) \langle n(\vec{r}) \rangle_t \\ & + \frac{i}{\hbar c} \int_{-\infty}^t dt' \int d^3r' \langle [\vec{j}_0(\vec{r}t), j_0(\vec{r}'t') \cdot \vec{A}(\vec{r}'t')] \rangle_t. \end{aligned} \quad (10.21)$$

Diese Gleichung ist ein Faltungsintegral. Für die ℓ . kartesische Komponente des Stroms gilt

$$\langle j_\ell(\vec{r}t) \rangle \equiv - \sum_m \int d^3r' dt' K_{\ell m}(\vec{r}t, \vec{r}'t') A_m(\vec{r}'t') \quad (10.22)$$

mit dem Matrix-Integralkern

$$K_{\ell m}(\vec{r}t, \vec{r}'t') \equiv \frac{e^2}{mc} \delta(\vec{r}-\vec{r}') \delta(t-t') \delta_{\ell m} \langle n(\vec{r}t) \rangle_t + \frac{1}{\hbar c} P_{\ell m}^R(\vec{r}t, \vec{r}'t') \quad (10.23)$$

und der retardierten Strom-(Strom-) Korrelationsfunktion

$$P_{\ell m}^R(\vec{r}t, \vec{r}'t') \equiv -i \theta(t-t') \langle [j_\ell^0(\vec{r}t), j_m^0(\vec{r}'t')] \rangle_t. \quad (10.24)$$

Mit der Kenntnis dieser Strom-Korrelationsfunktion ist auch die lineare Antwort bekannt. Wir nutzen nun wieder aus, daß unser ungestörtes System zeitunabhängig und räumlich homogen ist, d.h. $K_{\ell m}$ und $P_{\ell m}$ hängen nur von Zeit- und Ortsdifferenzen ab, z.B.

$$K_{\ell m}(\vec{r}t, \vec{r}'t') = K_{\ell m}(\vec{r}-\vec{r}', t-t') \equiv K_{\ell m}(\vec{g}, \tau). \quad (10.25)$$

Durch Fouriertransformation läßt sich dann unter Ausnutzung von

Glg. (5.16a) bzw.

$$\int dt \exp [i(\nu - \mu)t] = 2\pi \delta(\nu - \mu) \quad (10.26)$$

Glg. (10.22) als Produkt der Fourier-Koeffizienten schreiben

$$\langle j_\ell(\vec{q}\omega) \rangle = - \sum_m K_{\ell m}(\vec{q}\omega) A_m(\vec{q}\omega). \quad (10.27)$$

Die Fouriertransformierten der Komponenten des Matrix-Integralkerns sind wegen

$$\langle n(\vec{r}) \rangle_t = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) \sum_{\vec{k}} \langle c_{\vec{k}}^+ c_{\vec{k}+\vec{q}} \rangle_t = \frac{N}{V} \quad (10.28)$$

gleich

$$\begin{aligned} K_{\ell m}(\vec{q}\omega) &= \int d^3\vec{g} \int d\tau e^{-i\vec{q} \cdot \vec{g} + i\omega\tau} \left\{ \frac{e^2}{mc} \delta(\vec{g}) \delta(\tau) \delta_{\ell m} \frac{N}{V} + \frac{1}{\hbar c} P_{\ell m}^R(\vec{g}\tau) \right\} \\ &= \frac{e^2 N}{mc V} \delta_{\ell m} + \frac{1}{\hbar c V} P_{\ell m}^R(\vec{q}\omega). \end{aligned} \quad (10.29)$$

Statt die Fouriertransformierte von $P_{\ell m}^R(\vec{g}\tau)$ direkt zu berechnen, ist es günstiger, an die schon durchgeführte Berechnung der Dichtekorrelationsfunktion D^R anzuknüpfen. Zunächst muß wegen der räumlichen Translationsinvarianz $P_{\ell m}^R$ folgende Form haben (s. auch Glg. (5.22b))

$$P_{\ell m}^R(\vec{q}\tau) = -i \theta(\tau) \langle [j_\ell^0(\vec{q}\tau), j_m^0(-\vec{q}, 0)] \rangle_t. \quad (10.30)$$

Durch Einsetzen von $\vec{j}^0(\vec{q})$ Glg. (10.16) erhalten wir dann

$$i P_{\ell m}^R(\vec{q}\tau) = \theta(\tau) \left(\frac{e\hbar}{m} \right)^2 \sum_{\vec{k}, \vec{p}} \left(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2} \right)_\ell \left(\vec{p} - \frac{\vec{q}}{2} \right)_m \langle [c_{\vec{k}}^+(\tau) c_{\vec{k}+\vec{q}}(\tau), c_{\vec{p}}^+ c_{\vec{p}-\vec{q}}] \rangle_t. \quad (10.31)$$

10.3 Berechnung der Strom-Korrelationsfunktion

Der Erwartungswert des Kommutators wurde bereits für die Dichte-Korrelationsfunktion angegeben. Wie in Anhang B dargestellt ist, laufen die Berechnungen für die Dichte- und Strom-Korrelationsfunktionen weitgehend parallel. Der einzige Unterschied tritt bei der Auswertung jener Beiträge des Kommutators auf, die proportional $\delta_{\vec{k}, -\vec{p}}$ sind (vgl. Glg. B.9). Dies führt dazu, daß die Beiträge zur Strom-Korrelationsfunktion $\sim u_- v_- u_+^* v_+^*$ bzw. $\sim \Delta_- \Delta_+$ ihr Vorzeichen ändern.

Nach Durchführung der "Fouriertransformation" in die Frequenzdarstellung mit $z = \omega + i\epsilon$ erhalten wir schließlich

$$P_{lm}^R(\vec{q}, z) = \left(\frac{e\hbar}{m}\right)^2 \left\{ \frac{1}{4} q_l q_m T_1^- + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} k_l k_m [T_2^- + T_3^-] \right\}, \quad (10.32)$$

$$T_1^- \equiv -\frac{N_0}{E_q} (\tilde{\epsilon}_q + \Delta_q) \cdot \left\{ \frac{1}{z + E_q} - \frac{1}{z - E_q} \right\},$$

$$T_2^- \equiv +\frac{1}{2} (\bar{n}_- - \bar{n}_+) \left(\frac{\tilde{\epsilon}_- \tilde{\epsilon}_+ - \Delta_- \Delta_+}{E_- E_+} + 1 \right) \left\{ \frac{1}{z + (E_- - E_+)} - \frac{1}{z - (E_- - E_+)} \right\},$$

$$T_3^- \equiv -\frac{1}{2} (\bar{n}_- + \bar{n}_+ + 1) \left(\frac{\tilde{\epsilon}_- \tilde{\epsilon}_+ - \Delta_- \Delta_+}{E_- E_+} - 1 \right) \left\{ \frac{1}{z + (E_- + E_+)} - \frac{1}{z - (E_- + E_+)} \right\}.$$

Damit sind die Komponenten des "elektromagnetischen" Matrix-Integralkerns (wir haben nur den transversalen Teil berechnet!)

$$K_{lm}(\vec{q}, z) = \frac{e^2 N}{mcV} \delta_{lm} + \frac{1}{\hbar cV} P_{lm}^R(\vec{q}, z). \quad (10.33)$$

Formel (10.32) hat eine starke Ähnlichkeit mit dem Ergebnis für ein supraleitendes Fermi-System; der Vergleich ist im Anhang B durchgeführt.

10.4 Berechnung der suprafluiden Dichte

Bei dem in Abschnitt 9.2 beschriebenen Rotationsexperiment haben wir gesehen, daß die normale Komponente der Flüssigkeit durch Reibung an der Gefäßwand und innere Reibung nach hinreichend langer Zeit zum vollständigen Mitrotieren gezwungen wird. D.h., sie ist relativ zum rotierenden Gefäß in Ruhe, während die Supraflüssigkeit bzgl. des Gefäßes gegenläufig rotiert. Weiterhin interessiert uns bei der Berechnung der suprafluiden Dichte zunächst nur der statische Grenzfall ($\omega = 0$). Zur Vermeidung von Wirbelbildung sind ohnehin schwache äußere Felder erforderlich, die zudem räumlich nur schwach variieren sollen ($\vec{q} \rightarrow 0$). Dann lautet der Gesamtstrom im "elektromagnetischen Bild"

$$\langle \vec{j}(\vec{q}) \rangle = -\frac{e^2 N}{mcV} \vec{A} - \frac{1}{\hbar c V} \left(\frac{e\hbar}{m} \right)^2 \left\{ \frac{1}{4} \vec{q} (\vec{q} \cdot \vec{A}) T_1^- + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \vec{k} (\vec{k} \cdot \vec{A}) [T_2^- + T_3^-] \right\}, \quad (10.34)$$

wobei in T_i^- jeweils $z = 0$ gesetzt wird. Da $\vec{A}$ ein reines Wirbelfeld repräsentiert, verschwindet $\vec{q} \cdot \vec{A}$. Daher trägt der Term $\sim N_0$ nichts zum Suprastrom bei. Für kleine $\vec{q}$ vereinfachen sich wegen

$$E_k = (\xi_k^2 - \Delta_k^2)^{1/2} \quad (2.28)$$

die Faktoren vor den Energienennern in T_2^- und T_3^- erheblich; wir erhalten

$$T_3^- \approx 0 \quad (10.35)$$

$$T_2^- \approx \frac{\bar{n}_- - \bar{n}_+}{E_- - E_+} \approx \frac{\partial \bar{n}_k}{\partial E_k} \quad (10.36)$$

und damit für den Strom für $\vec{q} \rightarrow 0$

$$\langle \vec{j}(\vec{q}) \rangle = -\frac{e^2 N}{mcV} \vec{A}(\vec{q}) - \frac{1}{\hbar c} \left(\frac{e\hbar}{m} \right)^2 \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \vec{k} (\vec{k} \cdot \vec{A}) \frac{\partial \bar{n}_k}{\partial E_k}. \quad (10.37)$$

Bei der Auswertung des Integrals wählen wir etwa die Richtung von $\vec{A}$ als z-Richtung; dann verschwindet der Strom $\perp \vec{A}$ wegen

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta (\vec{k} \times \vec{A}) (\vec{k} \cdot \vec{A}) = \vec{e}_\perp k^2 A^2 \int_0^\pi (1 - \cos^2 \theta) \cos \theta d\theta = 0,$$

und wir erhalten für die Komponente in Richtung von $\vec{A}$

$$\begin{aligned} \langle \vec{j}(\vec{q}) \rangle &= -\frac{e^2 N}{mcV} \vec{A} - \frac{1}{\hbar c} \left(\frac{e\hbar}{m} \right)^2 \frac{2\pi}{(2\pi)^3} \int_0^\infty k^2 dk \int_{-1}^1 d\cos\theta k^2 \cos^2\theta \frac{\partial \bar{n}_k}{\partial E_k} \vec{A} \\ &= -\frac{e^2 N}{mcV} \vec{A} \left\{ 1 - \frac{\hbar^2 V}{6\pi^2 N m} \int_0^\infty k^4 dk \left(-\frac{\partial \bar{n}_k}{\partial E_k} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (10.38)$$

Offenbar ist der vom Feld induzierte Ladungsstrom proportional einer Dichte ρ_s (die - wie wir zeigen werden - als Dichte der supraflüssigen Komponente aufgefaßt werden kann)

$$\langle \vec{j} \rangle = -e \rho_s \vec{v}_A, \quad (10.39)$$

wobei der Feldimpuls durch $\vec{p}_A = m \vec{v}_A = \frac{-e}{c} \vec{A}$ gegeben ist. Durch Identifizierung folgt wegen $\rho = N/V$

$$\rho_s / \rho = 1 - \frac{\hbar^2 V}{6\pi^2 N m} \int_0^\infty k^4 dk \left(-\frac{\partial \bar{n}_k}{\partial E_k} \right). \quad (10.40)$$

Dasselbe Ergebnis erhalten wir für das neutrale rotierende System: dort ist der Teilchenstrom an das Wirbelfeld $\vec{v}_{\text{ext}} = \frac{1}{2} \vec{\Omega} \times \vec{r}$ gekoppelt

$$\langle \vec{j}_{\text{Teilchen}} \rangle = \rho_s \vec{v}_{\text{ext}}. \quad (10.41)$$

Diese "mechanische" Gleichung wird von demselben ρ_s aus Glg.(10.40) befriedigt. Dies sieht man sofort, wenn man durch Streichen von $-e$ vom Ladungsstrom zum Teilchenstrom übergeht und dann nach unseren Übersetzungsregeln Tab.II $(-e/c)\vec{A}$ durch $m \vec{v}_{\text{ext}}$ ersetzt.

Für $T \rightarrow 0$ geht die reduzierte suprafluide Dichte ρ_s / ρ offenbar gegen 1, denn es ist

$$\frac{\partial \bar{n}_k}{\partial E_k} = \frac{\beta}{4} [1 - \coth^2(\frac{1}{2}\beta E_k)] \xrightarrow{T \rightarrow 0} 0. \quad (10.42)$$

Für $T > T_\lambda$ gilt (für ein ideales Bose-Gas)

$$\begin{aligned} \int k^4 dk \frac{\partial \bar{n}_k}{\partial E_k} &= \frac{m}{\hbar^2} \int k^3 dk \frac{\partial \bar{n}_k}{\partial k} = -\frac{3m}{\hbar^2} \int k^2 dk \bar{n}_k \\ &= -\frac{6\pi^2 m}{\hbar^2 V} \sum_{\vec{k}} \bar{n}_k = -6\pi^2 m N / (V \hbar^2), \end{aligned} \quad (10.43)$$

wobei wir einmal partiell integriert haben. Also verschwindet in diesem Falle ρ_s oberhalb T_λ .

Wegen der komplizierten Struktur von E_k als Funktion von k läßt sich das Integral in Glg.(10.40) nur numerisch auswerten, (was allerdings schon bei der Berechnung der Lösungsparameter für die HF-Theorie gemacht werden kann). Die Ergebnisse für ρ_s/ρ sind als Funktion der reduzierten Temperatur T/T_λ in Abb.22 dargestellt. Zum Vergleich sind der "Ordnungsparameter" N_0/N der zugehörigen Lösung angegeben sowie das experimentell für Temperaturen in der Nähe von T_λ festgestellte $(T/T_\lambda)^{5.6}$ - Gesetz ³⁵⁾ (die Lösungsparameter sind dieselben wie beim Anregungsspektrum Abb.15).

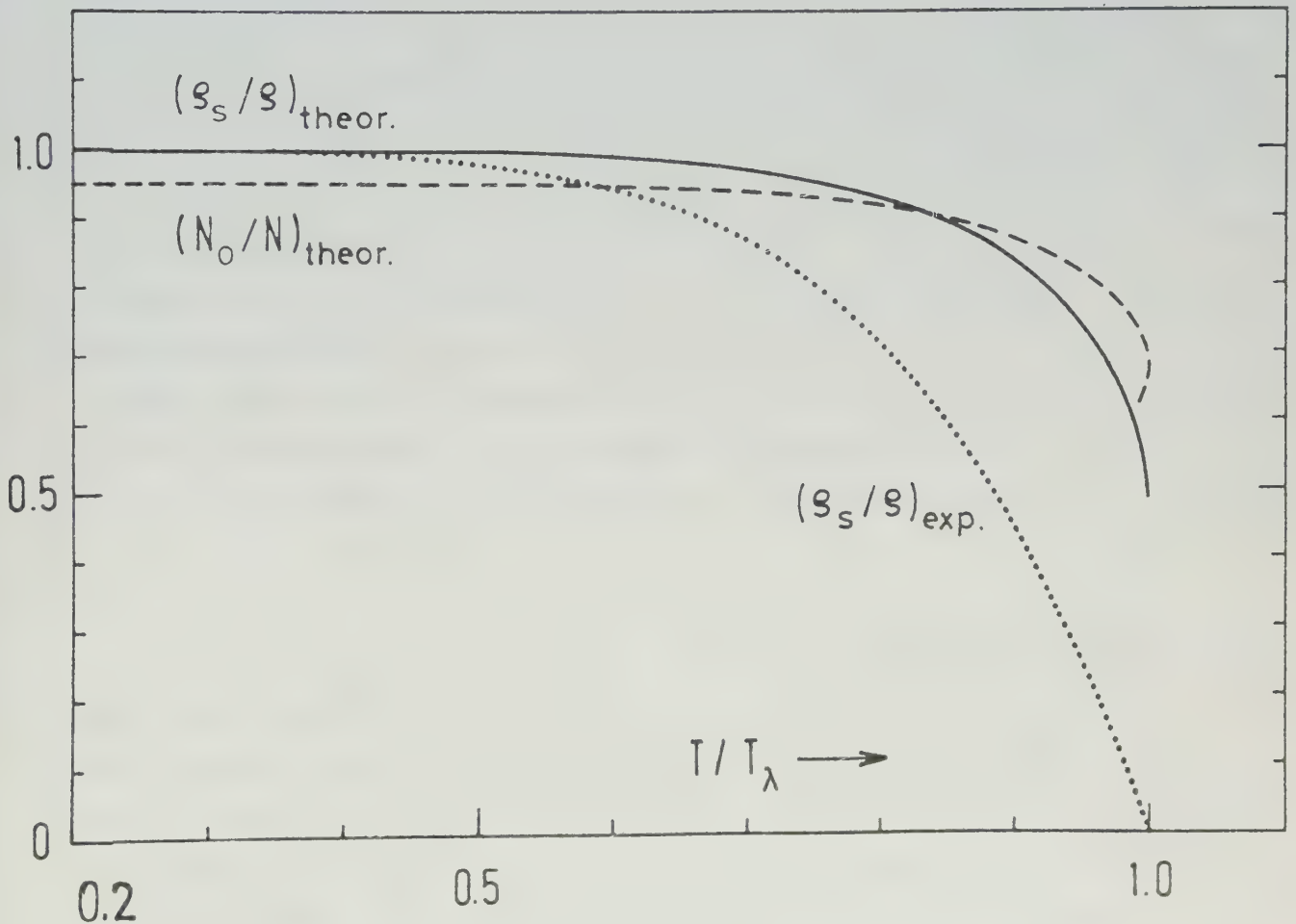


Abb. 22: Reduzierte suprafluide Dichte und Kondensatanteil

11. Diskussion der Ergebnisse

Die in den Kapiteln 8 und 10 aus den retardierten Dichte- und Strom-Korrelationsfunktionen abgeleiteten Systemeigenschaften zeigen in einer Reihe von Punkten recht gute Übereinstimmung mit den experimentellen Resultaten. Wir wollen hier die bereits geschilderten Ergebnisse zusammenfassen und auf einige weitere Übereinstimmungen und Diskrepanzen hinweisen.

11.1 Suprafluide Dichte

Die reduzierte suprafluide Dichte weist den korrekten Grenzwert $\rho_s/\rho \rightarrow 1$ für $T \rightarrow 0$ auf; er ergibt sich aus dem "Aussterben" der Quasiteilchen für $T \rightarrow 0$ (damit sterben natürlich auch die Anregungen aus, da keine Quasiteilchen-Anfangszustände mehr besetzt sind). Die Übereinstimmung zwischen dem experimentellen Verlauf und unserer Theorie ist für Temperaturen im Bereich von T_λ (der höchsten Temperatur, bis zu der kohärente Lösungen existieren) nicht einmal qualitativ zufriedenstellend. Der Kondensatanteil N_0/N verschwindet für $T \rightarrow T_\lambda$ nicht, sondern wird bei einem Wert von ca. 68% rückläufig. Dieser für einen Phasenübergang 1. Ordnung charakteristische Verlauf des Ordnungsparameters der Einteilchen-Theorie überträgt sich offenbar auf den Ordnungsparameter ρ_s/ρ der Zweiteilchen-Theorie, der daher nur bis auf einen Wert von ca. 50% abfällt.

11.2 Anregungsspektrum

Das Anregungsspektrum unserer Modellrechnung stimmt mit dem experimentellen Spektrum selbst quantitativ recht gut überein (für eine exakte Anpassungsrechnung müßten allerdings die Spektren bzgl. der Parameter Temperatur und Druck bzw. Dichte übereinstimmen). Dieses Ergebnis wurde mit einem recht simplen Modellpotential erzielt; vermutlich läßt sich durch eine verfeinerte Potentialapproximation eine bessere Anpassung erreichen. Im Gegensatz zum experimentellen Spektrum, bei dem das Rotonenminimum Δ folgende Temperatur- und Druckabhängigkeit hat ³⁶⁾

$$\Delta(p,T) = 8.68 [1 - 0.0084 (T/K)^7] [1 - 0.0075 (p/atm)] K, \quad (11.1)$$

weist unser Spektrum bei konstantem Potential eine Zunahme von Δ bei zunehmender Temperatur auf. Dies kann zweierlei Ursachen haben:

1. bei höheren Temperaturen nimmt die Zahl der "Rotonen" zu, eine Wechselwirkung dieser Anregungen untereinander führt zu einer Energieabsenkung.- In unserer Theorie wurde die Wechselwirkung zwischen den Anregungen nicht berücksichtigt - .
2. Das Potential besitzt eine Druck- und Temperaturabhängigkeit. In unserem Modell geben wir Teilchendichte, Temperatur und Potentialparameter fest vor. Es zeigt sich (s. Abb.23), daß bei konstantem Potential und zunehmender Temperatur der Druck als Funktion der Temperatur geradezu unrealistische Werte annimmt. Zur Kompensation der Druckzunahme müßten die Potentialparameter zu jeder Temperatur neu angepaßt werden. Dies ist in unserem Approximationsschema nicht ohne sehr großen numerischen Aufwand durchführbar und auch nicht das Ziel dieser Arbeit.

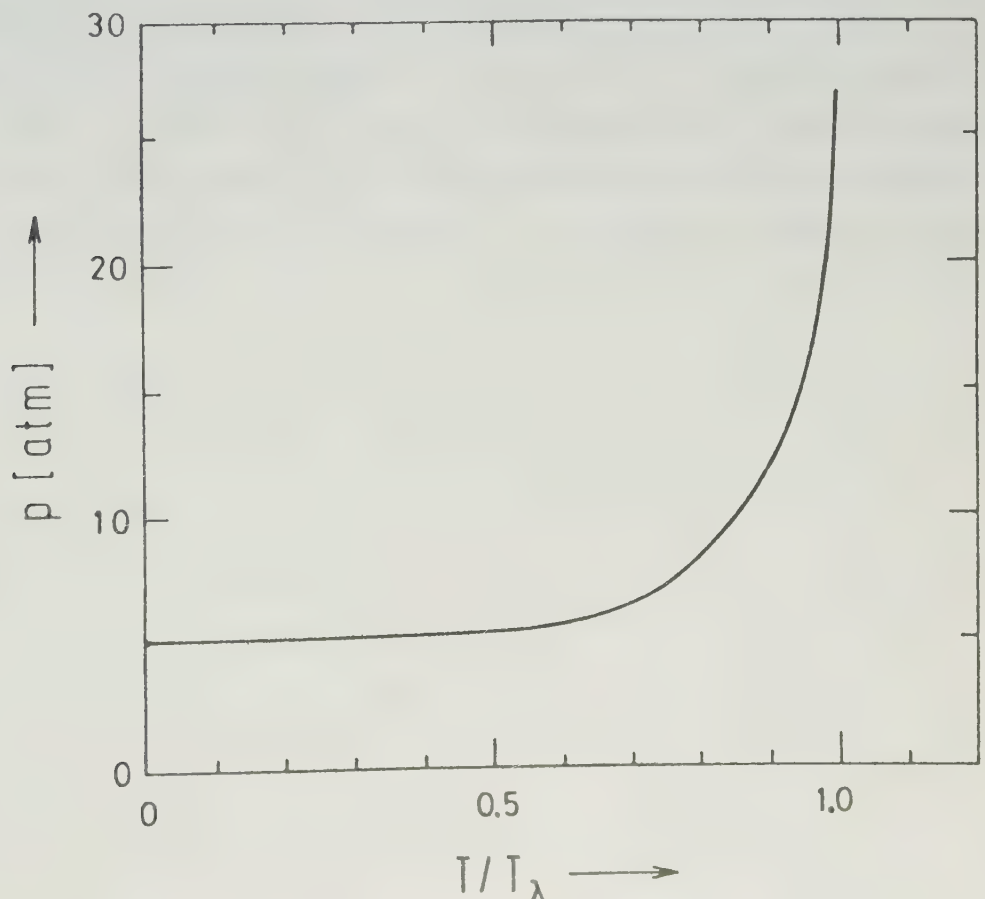


Abb. 23: Druck als Funktion der Temperatur für die "beste" Lösung (bei konstantem Potential und konstanter Dichte).

Unklar bleibt letztlich die Bedeutung des unteren 2.Astes des Anregungsspektrums. Die Schallgeschwindigkeit im ansteigenden Teil liegt zwischen den in Helium II beobachteten Geschwindigkeiten für den normalen und den 2.Schall (ein Gegeneinanderschwingen der supraflüssigen und der normalen Komponente gemäß dem Zweiflüssigkeits-Modell).

Weiterhin bleibt offen, ob die Absorption und Emission von Anregungsquanten unter endlichen Winkeln als Rotationsanregungen (oder z.B. als der für die Impulserhaltung notwendige "backflow") interpretiert werden können. Falls dieser Zweig kein Artefakt unserer Theorie ist, müßte er experimentell beobachtbar sein, wenn auch die Beobachtung durch die relativ geringe Energieabsorption (im Vergleich zum "Phonon-Roton"-Zweig) selbst bei Temperaturen nahe T_λ erschwert wird.

Die experimentell beobachtete Tatsache, daß der Phononenteil des Phonon-Roton-Zweiges für $0.2 \leq |\vec{k}| \leq 0.6 \text{ \AA}^{-1}$ auch für $T > T_\lambda$ noch existiert, führte Pines zu der Ansicht, daß das Phononenspektrum nicht durch das Kondensat, sondern durch die kurzreichweitigen Korrelationen (die durch den stark abstoßenden Kern des Potentials hervorgerufen werden) zustande kommen ¹⁷⁾. Nach unserer Theorie ist ein solches Spektrum oberhalb T_λ prinzipiell dann möglich, wenn die HF-Energien $E_k = \tilde{\epsilon}_k(N_0 \equiv 0)$ der normalen Phase von geeigneter Gestalt sind, d.h. gegenüber einem rein quadratischen Spektrum ein weiteres Extremum besitzen. Dabei ist vorausgesetzt, daß unsere Theorie, die wir in dieser Arbeit im Grenzfall sehr großer Lebensdauern ausgewertet haben, auch in diesem Bereich noch gültig ist.

11.3 Zusammenfassung

Wir haben in dieser Arbeit an Helium II gezeigt, daß das Anregungsspektrum eines realen Bose-Systems aus einer mikroskopischen Theorie unter Verwendung eines einfachen Modellpotentials gewonnen werden kann. Dieses Spektrum ist lückenfrei, für kleine Impulse linear und stimmt quantitativ recht gut mit dem experimentellen Spektrum überein. Das zugrunde liegende Quasiteilchenspektrum der aus dem Bogolubov'schen Variationsprinzip gewonnenen Einteilchentheorie weist keine der beiden Eigenschaften auf. Damit wird nur deutlich, daß die durch diese Methode gegebene definite, selbstkonsistente (verallgemeinerte) HF-Theorie nicht dem Hugenholtz-Pines-Theorem genügt. Jeder Versuch, die Übereinstimmung mit diesem Theorem zu erzwingen, zerstört entweder die Selbstkonsistenz oder führt zu Ergebnissen mit höherer freier Energie (Paar-Theorie mit Bose-Einstein-Kondensation und kondensatfreie Paar-Theorie). Aus dem letzteren Grunde muß auch die kondensatfreie Paar-Theorie verworfen werden, obwohl sie sich durch einen stetigen Phasenübergang gegenüber ihren Konkurrenten auszeichnet, die Phasenübergänge 1.Ordnungergeben. Dieser Phasenübergang findet bei Temperaturen $T_C < T_\lambda$ statt, wobei T_C durch den Schnittpunkt der freien Energien der normalen und der kondensierten Phase gegeben ist; bis zu T_λ gibt es Lösungen für die kondensierte Phase. Die beiden möglichen Ordnungsparameter der kondensierten Phase, der Kondensatanteil N_0/N und die reduzierte suprafluide Dichte ρ_s/ρ , verschwinden weder bei T_C noch bei T_λ .

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß die Kondensat-Theorie und die darauf aufbauende Zweiteilchentheorie offenbar recht gute Ergebnisse in der Nähe von $T \approx 0$ liefern. Während im Supraleiter wegen seiner großen Kohärenzlänge der Beitrag der Fluktuationen etwa zur spezifischen Wärme sich nur im Bereich von 10^{-7} K um die Übergangstemperatur bemerkbar macht ³⁷⁾, erhält man für Helium wegen seiner geringen Kohärenzlänge einen Temperaturbereich der Größenordnung 1 K (!) um T_λ ³³⁾. Angesichts dessen ist es nicht verwunderlich, daß eine Mittlere-Feld-Theorie den Phasenübergang von Helium I zu Helium II nicht mehr korrekt beschreibt. Eine mögliche Bose-Einstein-Kondensation wird auch für Exzitonen-

moleküle (Biexzitonen) in hochangeregten Halbleitern diskutiert ³⁸⁾. In diesem System kann die Dichte in einem weiten Bereich variiert und damit auch die Kohärenzlänge beeinflußt werden. Andererseits schränkt die endliche Lebensdauer dieser exzitonischen Anregungen den Gültigkeitsbereich einer "mean-field"-Theorie ein: es muß sichergestellt sein, daß die Lebensdauer größer ist als die Zeit, die zur Einstellung eines Quasi-Gleichgewichts benötigt wird.

12. Literaturverzeichnis

1. F. London, Superfluids, Vol.II (Wiley, New York, 1954)
2. J. Bardeen, L. Cooper, and J. Schrieffer, Phys. Rev. 108, 1175 (1957)
3. N.N. Bogolubov, J. Phys. USSR 11, 23 (1947)
4. L.D. Landau, J. Phys. USSR 5, 71 (1941) und 11, 91 (1947)
5. D.G. Henshaw and A.D.B. Woods, Phys. Rev. 121, 1266 (1961)
6. S. Beliaev, Sov. Phys.-JETP 7, 289 und 299 (1958)
7. V.V. Tolmachev, Sov. Phys.-Doklady 5, 984 (1960)
8. N.N. Bogolubov, Nuovo Cimento 7, 794 (1968)
s. auch H. Falk, Am. J. Phys. 38, 858 (1970)
9. H.A. Mook, Phys. Rev. Lett. 32, 1167 (1974)
10. A.D.B. Woods and V.F. Sears, Phys. Rev. Lett. 39, 415 (1974)
11. W.A.B. Evans and Y. Imry, Nuovo Cimento 63 B, 155 (1969)
12. J.G. Valatin and D. Butler, Nuovo Cimento 10, 37 (1958)
13. W.A.B. Evans and C.G. Harris, to be published
14. K. Fukushima, N. Koyama, and T. Sugiyama, Prog. Theor. Phys. 61, 367 (1979)
15. R.P. Feynman, Phys. Rev. 94, 262 (1954)
16. R.P. Feynman and M. Cohen, Phys. Rev. 102, 1189 (1956)
17. D. Pines, in: Quantum fluids, ed. by D.F. Brewer, (North Holland Publishing Company, Amsterdam, 1966), S. 257
18. C.H. Aldrich III and D. Pines, J. Low Temp. Phys. 25, 677 (1976)
C.H. Aldrich III, C.J. Pethick, and D. Pines, J. Low Temp. Phys. 25, 691 (1976)
19. P. Dörre, H. Haug, M. Heise, and R.J. Jelitto, Z. Physik B 34, 117 (1979)
20. P. Dörre, H. Haug, and D.B. Tran Thoai, J. Low Temp. Phys. 35, 465 (1979)
21. F. Wagner and H. Koppe, Z. Naturforsch. 20a, 1553 (1965)
22. G. Jordan-Engeln and F. Reutter, Formelsammlung zur Numerischen Mathematik mit Fortran IV-Programmen, (Hochschultaschenbücher 106, Bibliograph. Institut, Mannheim, 1974) S. 255
23. N.M. Hugenholtz and D. Pines, Phys. Rev. 116, 489 (1959)
24. W.A.B. Evans and R.I.M.A. Raschid, J. Low Temp. Phys. 2, 93 (1973)

25. J.M. Ziman, Elements of Advanced Quantum Theory, (Cambridge University Press, Cambridge, 1969)
26. D. Pines and P. Nozières, The Theory of Quantum Liquids, Vol.I, (W.A. Benjamin, New York, 1966) S. 90, S. 138
27. A.L. Fetter and J.D. Walecka, Quantum Theory of Many-Particle Systems (McGraw-Hill, New York, 1971)
28. R.A. Cowley and A.D.B. Woods, Can. J. Phys. 49, 177 (1971)
29. K.R. Atkins and R.A. Stasior, Can. J. Phys. 31, 1156 (1953)
30. L.P. Pitaevski, Sov. Phys.-JETP 9, 830 (1959)
31. C.T. Lane, Superfluid Physics, (McGraw-Hill, New York, 1962), S. 39
32. G.B. Hess and W.M. Fairbank, Proc. of the 10th Intern. Conf. on Low Temp. Phys., Moscow, 1966, Vol.I, S. 423
33. W.F. Vinen, in: Superconductivity, ed. by R.D. Parks, Vol.II (M. Dekker, New York, 1964) S. 1167
34. J.R. Schrieffer, Theory of Superconductivity, (W.A. Benjamin, New York, 1964)
35. E. Andronikashvili, Sov. Phys.-JETP 18, 429 (1948)
36. R.J.Donnelly, Experimental Superfluidity, (The University of Chicago Press, Chicago, 1967), S. 213
37. J.S. Shier and D.M. Ginsberg, Phys. Rev. 147, 384 (1966)
38. E. Hanamura and H. Haug, Phys. Reports 33C, (4), 209 (1977)
39. L.P. Kadanoff and G. Baym, Quantum Statistical Mechanics, (W.A. Benjamin, New York, 1962) .

Anhang A Berechnung der Dichte-Korrelationsfunktionen mit Temperatur-Green'schen Funktionen.

Die in Abb. 12 diagrammatisch dargestellte Approximation für die (retardierte) Dichte-Korrelationsfunktion (= wahre Polarisationsfunktion Π_R^*) läßt sich für beliebige Temperaturen mit Hilfe von Temperatur-Green'schen Funktionen berechnen, da (wie im folgenden noch gezeigt wird) die retardierte Funktion und die dazugehörige Temperatur-Funktion dieselbe Spektralfunktion Δ (s. Glg. (6.15)) haben und die erstere aus der letzteren durch analytische Fortsetzung

$$i \omega_n \rightarrow \omega + i\epsilon \quad \text{mit} \quad \epsilon \rightarrow 0^+$$

hervorgeht.

Wir verwenden hier die Notation des Lehrbuchs von Fetter/Walecka²⁷⁾ (mit $\hbar = k_B = 1$).

Die den in Glg. (7.24) definierten Green'schen Funktionen entsprechenden Temperatur-Green'schen Funktionen sind in unserer Approximation gegeben durch (T_τ ordnet die "Zeiten" τ)

$$\begin{aligned} \tilde{G}(\vec{k}\tau) &= - \langle T_\tau (c_{\vec{k}}(\tau) c_{\vec{k}}^+(0)) \rangle_t \\ \tilde{G}_{12}(\vec{k}\tau) &= - \langle T_\tau (c_{\vec{k}}(\tau) c_{-\vec{k}}(0)) \rangle_t \\ \tilde{G}_{21}(\vec{k}\tau) &= - \langle T_\tau (c_{-\vec{k}}^+(\tau) c_{\vec{k}}^+(0)) \rangle_t \end{aligned} \quad (A.1)$$

wobei die "Zeitabhängigkeit" durch das Heisenbergbild bzgl. H_t gegeben ist

$$\begin{aligned} c_{\vec{k}}(\tau) &= \exp(H_t \tau) c_{\vec{k}} \exp(-H_t \tau) \\ &= u_k \bar{c}_{\vec{k}}(\tau) + v_k \bar{c}_{-\vec{k}}^+(\tau) + \delta_{k0} \zeta(\tau) \end{aligned} \quad (A.2)$$

und

$$\begin{aligned} \bar{c}_{\vec{k}}(\tau) &= \exp(-E_k \tau) \bar{c}_{\vec{k}} \\ \bar{c}_{\vec{k}}^+(\tau) &= \exp(+E_k \tau) \bar{c}_{\vec{k}}^+ \end{aligned} \quad (A.3)$$

$$\zeta(\tau) = \zeta = \text{const.}$$

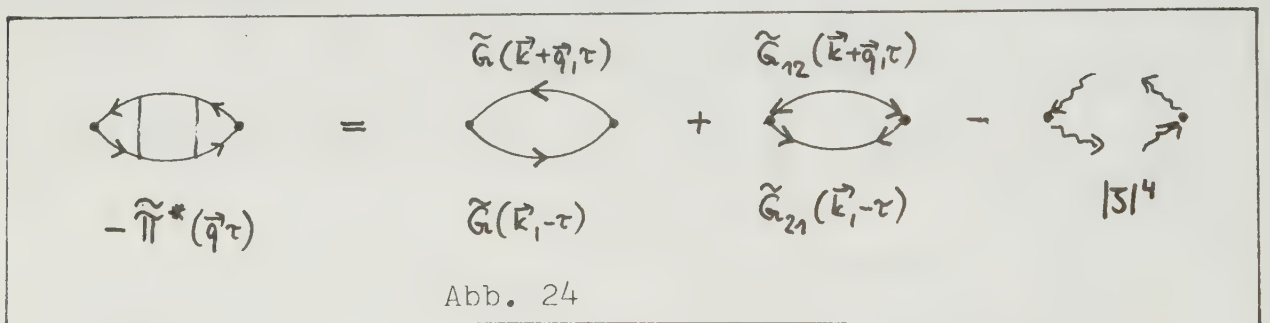
Die wahre Temperatur-Polarisationsfunktion ist dann gleich der

Temperatur-Dichtekorrelationsfunktion, definiert durch

$$\begin{aligned}
 \tilde{\Pi}^*(\vec{q}\tau) &= \tilde{D}(\vec{q}\tau) \equiv - \langle T_\tau (n_{\vec{q}}(\tau) n_{-\vec{q}}(0)) \rangle_t \\
 &= - \sum_{\vec{k}, \vec{p}} \langle T_\tau (c_{\vec{k}}^+(\tau) c_{\vec{k}+\vec{q}}(\tau) c_{\vec{p}}^+ c_{\vec{p}-\vec{q}}) \rangle_t \quad (A.4) \\
 &= - \sum_{\vec{k}} \left\{ \langle T_\tau (c_{\vec{k}}^+(\tau) c_{\vec{k}}) \rangle_t \langle T_\tau (c_{\vec{k}+\vec{q}}(\tau) c_{\vec{k}+\vec{q}}^+) \rangle_t \right. \\
 &\quad \left. + \langle T_\tau (c_{\vec{k}}^+(\tau) c_{-\vec{k}}^+) \rangle_t \langle T_\tau (c_{\vec{k}+\vec{q}}(\tau) c_{-\vec{k}-\vec{q}}) \rangle_t \right\} \\
 &= - \sum \left\{ \tilde{G}(\vec{k}, -\tau) \tilde{G}(\vec{k}+\vec{q}, \tau) + \tilde{G}_{21}(\vec{k}, -\tau) \tilde{G}_{12}(\vec{k}+\vec{q}, \tau) \right\}
 \end{aligned}$$

(Wir betrachten nur Anregungen mit $\vec{q} \neq 0$ und haben daher die faktorisierenden Terme für $\vec{q} \equiv 0$ schon unterdrückt). Hier sind zur Vereinfachung die c-Zahl-Terme für $\vec{k} = 0$ bzw. $\vec{k} + \vec{q} = 0$ in die Funktionen einbezogen worden. Wir müssen jedoch noch zusätzlich die Kondensat-Beiträge $\propto |\zeta|^4$ eliminieren, da diese sich gerade gegen die entsprechenden Beiträge der schon vernachlässigten faktorisierenden Terme wegheben. (Strenggenommen hätte man $\tilde{D}(\vec{q}\tau)$ mit Hilfe der Fluktuationsoperatoren $\tilde{n}_q$ (s. Glg. 6.20) definieren müssen; dann ist das Wegheben der Beiträge offensichtlich).

Die Approximation reduziert sich dann auf die in Abb. 24 dargestellten Diagramme



Die normalen und anomalen Temperatur-Green'schen Funktionen lauten dann

$$\begin{aligned}
 \tilde{G}(\vec{k}\tau) &= - |u_k|^2 \langle T_\tau (\bar{c}_{\vec{k}}(\tau) \bar{c}_{\vec{k}}^+) \rangle_t - |v_k|^2 \langle T_\tau (\bar{c}_{-\vec{k}}^+(\tau) \bar{c}_{-\vec{k}}) \rangle_t - |\zeta|^2 \delta_{k0} \\
 &= - \left\{ |u_k|^2 (\bar{n}_k + 1) \exp(-E_k \tau) + |v_k|^2 \bar{n}_k \exp(E_k \tau) \right\} \theta(\tau) \\
 &\quad - \left\{ |u_k|^2 \bar{n}_k \exp(-E_k \tau) + |v_k|^2 (\bar{n}_k + 1) \exp(E_k \tau) \right\} \theta(-\tau) - |\zeta|^2 \delta_{k0}
 \end{aligned} \quad (A.5)$$

$$\begin{aligned}\tilde{G}_{12}(\vec{k}\tau) &= - u_k v_k \left\{ (\bar{n}_k+1)\exp(-E_k\tau) + \bar{n}_k \exp(E_k\tau) \right\} \theta(\tau) \\ &\quad - u_k v_k \left\{ \bar{n}_k \exp(-E_k\tau) + (\bar{n}_k+1)\exp(E_k\tau) \right\} \theta(-\tau) - \zeta^2 \delta_{k0},\end{aligned}\quad (A.6)$$

$$\begin{aligned}\tilde{G}_{21}(\vec{k}\tau) &= - u_k^* v_k^* \left\{ (\bar{n}_k+1)\exp(-E_k\tau) + \bar{n}_k \exp(E_k\tau) \right\} \theta(\tau) \\ &\quad - u_k^* v_k^* \left\{ \bar{n}_k \exp(-E_k\tau) + (\bar{n}_k+1)\exp(E_k\tau) \right\} \theta(-\tau) - \zeta^{*2} \delta_{k0} . \\ &= \tilde{G}_{12}^*(\vec{k}\tau)\end{aligned}\quad (A.7)$$

Unser Ziel ist die Berechnung der Fouriertransformierten der Temperatur-Polarisationsfunktion

$$\tilde{\Pi}^*(\vec{q}v_\ell) = \int_0^\beta d\tau \exp(i v_\ell \tau) \tilde{\Pi}^*(\vec{q}\tau) \quad (A.8)$$

mit

$$\tilde{\Pi}^*(\vec{q}\tau) = T^2 \sum_m \exp(-i\omega_m\tau) \sum_n \exp(-i\omega_n\tau) \sum_{\vec{k}} \left\{ \dots \right\}, \quad (A.9)$$

$$\left\{ \dots \right\} = - \tilde{G}(\vec{k}+\vec{q}, \omega_m) \tilde{G}(\vec{k}, -\omega_n) - \tilde{G}_{12}(\vec{k}+\vec{q}, \omega_m) \tilde{G}_{21}(\vec{k}, -\omega_n).$$

(Die geschweifte Klammer ist im Hinblick auf Abb. 24 mit der Vorschrift auszuwerten, daß die Beiträge $\sim |\zeta|^4$ zu unterdrücken sind).

Wir merken an dieser Stelle noch an, daß die hier benutzten Temperatur-Green'schen Funktionen für Bosonen periodisch sind, sofern ihre "Zeitabhängigkeit" durch einen großkanonischen Hamilton-Operator gegeben ist.

Ihr Periodizitätsintervall ist $[0, \beta]$ (vgl. Fetter/Walecka²⁷⁾ S.236), so daß sie gemäß

$$\tilde{G}(\vec{k}, \pm\tau) = T \sum_n \exp(-i\omega_n\tau) \tilde{G}(\vec{k}, \pm\omega_n) \quad (A.10)$$

in eine Fourierreihe mit geraden Frequenzen für Bosonen

$$\omega_n = 2 n \pi T \quad (A.11)$$

entwickelt werden können. Bei der Rücktransformation beschränkt sich das τ -Integral auf das Periodizitätsintervall

$$\tilde{G}(\vec{k}, \omega_m) = \int_0^\beta d\tau \exp(i\omega_m\tau) \tilde{G}(\vec{k}\tau) . \quad (A.12)$$

Das Hintereinanderanwenden von Hin- und Rücktransformation liefert

schließlich je nach Reihenfolge die Vollständigkeits- und Orthogonalitätsrelationen in der Form

$$\tau \sum_n \exp(\pm i\omega_n \tau) = \delta(\tau) , \quad (\text{A.13})$$

$$\int_0^\beta d\tau \exp[\pm i(\omega_m - \omega_n)\tau] = \beta \delta_{\omega_m, \omega_n} . \quad (\text{A.14})$$

Die fourierentwickelte normale Green'sche Funktion ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \tilde{G}(\vec{k}, \omega_n) &= -\beta |\zeta|^2 \delta_{k0} \delta_{\omega_n, 0} - \frac{|u_k|^2 (\bar{n}_k + 1)}{i\omega_n - E_k} \exp[(i\omega_n - E_k)\tau] \Big|_0^\beta \\ &\quad - \frac{|v_k|^2 \bar{n}_k}{i\omega_n + E_k} \exp[(i\omega_n + E_k)\tau] \Big|_0^\beta \\ &= -\beta |\zeta|^2 \delta_{k0} \delta_{\omega_n, 0} + \frac{|u_k|^2}{i\omega_n - E_k} - \frac{|v_k|^2}{i\omega_n + E_k} . \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Hierzu trägt nur der Term $\propto \theta(\tau)$ bei!

Zur Berechnung haben wir neben Glg. (A.13) benutzt

$$\begin{aligned} \exp[(i\omega_n \pm E_k)\tau] \Big|_0^\beta &= \exp(2n\pi i) \exp(\pm \beta E_k) - 1 \\ &= \exp(\pm \beta E_k) - 1 = \begin{cases} \bar{n}_k^{-1} & (+) \\ -(\bar{n}_k + 1)^{-1} & (-) \end{cases} . \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Für $\tau < 0$ trägt nur der Term $\propto \theta(-\tau)$ bei (d.h. formal vertausche man $|u_k|^2 \leftrightarrow |v_k|^2$).

Entsprechend erhält man für die anomalen Green'schen Funktionen

$$\tilde{G}_{12}(\vec{k}, \omega_n) = -\beta \zeta^2 \delta_{k0} \delta_{\omega_n, 0} + u_k v_k \left(\frac{1}{i\omega_n - E_k} - \frac{1}{i\omega_n + E_k} \right), \quad (\text{A.17})$$

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{21}(\vec{k}, \omega_n) &= -\beta \zeta^{*2} \delta_{k0} \delta_{\omega_n, 0} + u_k^* v_k^* \left(\frac{1}{i\omega_n - E_k} - \frac{1}{i\omega_n + E_k} \right) \\ &= \tilde{G}_{12}^*(\vec{k}, \omega_n) . \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Als nächsten Schritt berechnen wir die Produkte aus den Green'schen Funktionen in Glg. (A.9). Es ist (die doppelten Impuls-Indices sind wie folgt zu verstehen: $k + q \triangleq |\vec{k} + \vec{q}|$)

$$\{ \dots \} = -[-\beta |\zeta|^2 \delta_{\omega_m, 0} \delta_{\vec{k}, \vec{q}} + \frac{|u_{k+q}|^2}{i\omega_m - E_{k+q}} - \frac{|v_{k+q}|^2}{i\omega_m + E_{k+q}}] \times$$

$$\begin{aligned}
 & \times \left(-\beta |\zeta|^2 \delta_{\omega_n 0} \delta_{k0} + \frac{|v_k|^2}{i\omega_n - E_k} - \frac{|u_k|^2}{i\omega_n + E_k} \right) \\
 & - \left(-\beta \zeta^2 \delta_{\omega_m 0} \delta_{\vec{k}, \vec{q}} + \frac{u_{k+q} v_{k+q}}{i\omega_m - E_{k+q}} - \frac{u_{k+q} v_{k+q}}{i\omega_m + E_{k+q}} \right) \times \\
 & \times \left(-\beta \zeta^{*2} \delta_{\omega_n 0} \delta_{k0} + \frac{u_k^* v_k^*}{i\omega_n - E_k} - \frac{u_k^* v_k^*}{i\omega_n + E_k} \right) .
 \end{aligned} \tag{A.19}$$

Dann folgt die Polarisationsfunktion nach Glg. (A.9) und (A.14)

$$\begin{aligned}
 \tilde{\Pi}^*(\vec{q}_{v_\ell}) &= \int_0^\beta d\tau T^2 \sum_{m,n} \exp [i(v_\ell - \omega_m - \omega_n)\tau] \sum_{\vec{k}} \{ \dots \} \\
 &= T \sum_{m,n} \delta_{\omega_m, v_\ell - \omega_n} \sum_{\vec{k}} \{ \dots \} .
 \end{aligned} \tag{A.20}$$

Nach der Durchführung der Summe über m erhalten wir

$$\begin{aligned}
 \tilde{\Pi}^*(\vec{q}_{v_\ell}) &= \left\{ |\zeta|^2 (|u_q|^2 + |v_q|^2) + \zeta^2 u_q^* v_q^* + \zeta^{*2} u_q v_q \right\} \left(\frac{1}{i v_\ell - E_q} - \frac{1}{i v_\ell + E_q} \right) \\
 &+ T \sum_n \sum_{\vec{k}} \left\{ - \frac{|u_{k+q}|^2 |v_k|^2 + u_{k+q} v_{k+q} u_k^* v_k^*}{(i v_\ell - i \omega_n - E_{k+q})(i \omega_n - E_k)} \right. \\
 &+ \frac{|u_{k+q}| |u_k|^2 + u_{k+q} v_{k+q} u_k^* v_k^*}{(i v_\ell - i \omega_n - E_{k+q})(i \omega_n + E_k)} \\
 &+ \frac{|v_{k+q}|^2 |v_k|^2 + u_{k+q} v_{k+q} u_k^* v_k^*}{(i v_\ell - i \omega_n + E_{k+q})(i \omega_n - E_k)} \\
 &\left. - \frac{|v_{k+q}|^2 |u_k|^2 + u_{k+q} v_{k+q} u_k^* v_k^*}{(i v_\ell - i \omega_n + E_{k+q})(i \omega_n + E_k)} \right\} .
 \end{aligned} \tag{A.21}$$

Als nächsten Schritt führen wir die Frequenzsummen aus. Die Nenner in der Frequenzsumme sind vom Typ

$$N = (i v_\ell - i \omega_n \pm E_{k+q})(i \omega_n \pm E_k) \tag{A.22}$$

mit vier verschiedenen Vorzeichen-Kombinationen. Für $|\omega_n| \rightarrow \infty$

sind typische Terme der Frequenzsumme von der Ordnung $|\omega_n|^{-2}$; die Summe konvergiert also absolut.

Eine Möglichkeit der Berechnung besteht darin, eine Partialbruchzerlegung durchzuführen und die einzelnen Terme (die dann nur noch $\propto |\omega_n|^{-1}$ sind!) mit einem Konvergenzfaktor $\exp(i \omega_n n)$, $n \rightarrow 0^+$, zu verzieren (s. z.B. Lit.²⁷⁾ S. 272).

Zur Partialbruchzerlegung machen wir den Ansatz

$$N^{-1} = \frac{A}{i\nu_\ell - i\omega_n \pm E_{k+q}} + \frac{B}{i\omega_n \pm E_k} . \quad (\text{A.23})$$

Dann folgt $A(i\omega_n \pm E_k) + B(i\nu_\ell - i\omega_n \pm E_{k+q}) = 1$

mit der Bedingung $A i\omega_n - B i\omega_n = 0 \leftrightarrow A = B .$

4 Lösungen: $A_{\pm \pm} = (i\nu_\ell \pm E_{k+q} \pm E_k)^{-1} . \quad (\text{A.24})$

(Das erste Vorzeichen bezieht sich auf E_{k+q} , das zweite auf E_k !)

Nun bleibt noch mit $\omega_n = 2 n \pi T$ zu berechnen

$$\begin{aligned} Y_{\pm}^{(1)} &= T \sum_n (i\nu_\ell - i\omega_n \pm E_{k+q})^{-1} , \\ Y_{\pm}^{(2)} &= T \sum_n (i\omega_n \pm E_k)^{-1} . \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

Die ausführliche Methode, wie man diese Frequenzsummen durch ein Wegintegral in der komplexen Ebene berechnet, ist z.B. in den Lehrbüchern von Kadanoff/Baym³⁹⁾ S. 196 ff und von Fetter/Walecka²⁷⁾ S. 248 ff beschrieben. Mit Formel (25.38) aus dem letztgenannten Lehrbuch erhalten wir (für Bosonen)

$$\lim_{n \rightarrow 0^+} T \sum_n \exp(i\omega_n n) (i\omega_n - x)^{-1} = - [\exp(\beta x) - 1]^{-1} \quad (\text{A.26})$$

und damit wegen $\exp(\pm i\beta\nu_\ell) = +1$

$$\begin{aligned} Y_{\pm}^{(1)} &= [\exp(\pm \beta E_{k+q}) - 1]^{-1} = \begin{cases} + \bar{n}_{k+q} & (+) \\ -(\bar{n}_{k+q} + 1) & (-) \end{cases} \\ Y_{\pm}^{(2)} &= [\exp(\pm \beta E_k) - 1] = \begin{cases} +(\bar{n}_k + 1) & (+) \\ -\bar{n}_k & (-) \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

Damit erhalten wir schließlich

$$\begin{aligned}\tilde{\Pi}^*(\vec{q}_{\nu_{\ell}}) &= Z'_1 \left(\frac{1}{i\nu_{\ell} - E_q} - \frac{1}{i\nu_{\ell} + E_q} \right) \\ &- Z'_2 A_{--}(-\bar{n}_{k+q}-1-\bar{n}_k) + Z'_3 A_{-+}(-\bar{n}_{k+q}-1+\bar{n}_k+1) \quad (A.28) \\ &+ Z'_4 A_{+-}(\bar{n}_{k+q}-\bar{n}_k) - Z'_5 A_{++}(\bar{n}_{k+q}+\bar{n}_k+1)\end{aligned}$$

wobei die Z'_i die Zähler (bzw. Vorfaktoren) der einzelnen Terme in Glg. (A.21) darstellen. Als letzten Schritt bringen wir Glg. (A.28) auf die Form von (7.18) durch Umstellen der Terme und Wechsel der Summationsvariablen $\vec{k} \rightarrow \vec{k} + \vec{q}/2$.

$$\begin{aligned}\tilde{\Pi}^*(\vec{q}_{\nu_{\ell}}) &= - Z'_1 \left(\frac{1}{i\nu_{\ell} + E_q} - \frac{1}{i\nu_{\ell} - E_q} \right) \\ &+ \sum (\bar{n}_- - \bar{n}_+) \left(\frac{Z'_3}{i\nu_{\ell} + (E_- - E_+)} - \frac{Z'_4}{i\nu_{\ell} - (E_- - E_+)} \right) \quad (A.29) \\ &- \sum (\bar{n}_+ + \bar{n}_- + 1) \left(\frac{Z'_5}{i\nu_{\ell} + (E_- + E_+)} - \frac{Z'_2}{i\nu_{\ell} - (E_- + E_+)} \right).\end{aligned}$$

Es entsprechen sich also

$$Z'_1 = -Z_1, \quad Z'_2 = Z_5, \quad Z'_3 = Z_2, \quad Z'_4 = Z_3, \quad Z'_5 = Z_4,$$

wie durch Vergleich mit den Glgn. (7.15) und (7.17) ersichtlich ist.

Zum Abschluß bleibt noch zu zeigen, daß die (exakte) Temperatur-Polarisationsfunktion und die (exakte) retardierte Dichte-Korrelationsfunktion dieselbe Spektralfunktion haben, mithin also die retardierte Funktion aus der Temperaturfunktion durch analytische Fortsetzung $i\nu_n \rightarrow z = \omega + i\varepsilon$ gewonnen werden kann. Nach Glg. (6.16) ist die Spektralfunktion von D^R die Funktion Δ Glg. (6.6). In Analogie zu Glg. (6.3) gilt nach Auswertung der "Zeitabhängigkeit" für die "zeitgeordnete" Temperatur-Funktion $\tilde{D} = \tilde{\Pi}$

$$\begin{aligned}\tilde{D}(\vec{k}_{\tau}) &= - \langle T_{\tau} [n_{\vec{k}}^{\rightarrow}(\tau) n_{-\vec{k}}^{\rightarrow}(0)] \rangle \quad (A.30) \\ &= - Z^{-1} \sum_{m,n} M_{\vec{k}} \left\{ e^{-\beta K_m} e^{(K_m - K_n)\tau} \theta(\tau) + e^{-\beta K_n} e^{(K_m - K_n)\tau} \theta(-\tau) \right\}.\end{aligned}$$

Die Fouriertransformierte bezgl. τ ist $\tilde{D}(\vec{k}_{\nu_n}) = \int_0^{\beta} d\tau e^{i\nu_n \tau} \tilde{D}(\vec{k}_{\tau})$ (A.31)

$$\begin{aligned}
 &= - Z^{-1} \sum_{m,n} M_{\vec{k}} e^{-\beta K_m} \frac{1}{i\nu_n + K_m - K_n} (e^{\beta(K_m - K_n)} - 1) \quad (A.31) \\
 &= - Z^{-1} \sum M_{\vec{k}} (e^{-\beta K_m} - e^{-\beta K_n}) \frac{1}{i\nu_n + K_m - K_n} .
 \end{aligned}$$

Diese Funktion läßt sich darstellen als

$$\tilde{D}(\vec{k}, \nu_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\Delta(\vec{k}, \omega')}{i\nu_n - \omega'} \quad (A.32)$$

mit (s. Glg.(6.6))

$$\Delta(\vec{k}, \omega') = 2\pi Z^{-1} \sum_{m,n} \delta(\omega' + K_m - K_n) (e^{-\beta K_m} - e^{-\beta K_n}) M_{\vec{k}} \quad (A.33)$$

wie man durch Einsetzen leicht verifiziert. Damit ist alles gezeigt, denn für die retardierte Dichte-Korrelationsfunktion galt bereits

$$D^R(\vec{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\Delta(\vec{k}, \omega')}{(\omega + i\varepsilon) - \omega'} . \quad (6.16)$$

Anhang B Retardierte Dichte- und Strom-Korrelationsfunktion in supraflüssigen Bose- und supraleitenden Fermi-Systemen

Die retardierte Dichte-Korrelationsfunktion ist nach den Glgn. (5.23) und (5.24) im Bosonensystem gegeben durch

$$iD^R(\vec{q}\tau) = \theta(\tau) \sum_{\vec{k}, \vec{p}} \langle [c_{\vec{k}}^+(\tau) c_{\vec{k}+\vec{q}}(\tau), c_{\vec{p}}^+ c_{\vec{p}-\vec{q}}] \rangle_t, \quad (B.1)$$

wobei wir mit H_t gemittelt und Faktoren $e^{-\varepsilon\tau}$ unterdrückt haben. Entsprechend gilt nach Glg. (10.31) für die retardierte Strom-Korrelationsfunktion (Matrixkomponenten)

$$iP_{lm}^R(\vec{q}\tau) = \theta(\tau) \left(\frac{e\hbar}{m}\right)^2 \sum_{\vec{k}, \vec{p}} (\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2})_l (\vec{p} - \frac{\vec{q}}{2})_m \langle [c_{\vec{k}}^+(\tau) c_{\vec{k}+\vec{q}}(\tau), c_{\vec{p}}^+ c_{\vec{p}-\vec{q}}] \rangle_t. \quad (B.2)$$

Die beiden Funktionen $D^R(\vec{q}\tau)$ und $P_{lm}^R(\vec{q}\tau)$ enthalten dann denselben Erwartungswert

$$A \equiv \langle [c_{\vec{k}}^+(\tau) c_{\vec{k}+\vec{q}}(\tau), c_{\vec{p}}^+ c_{\vec{p}-\vec{q}}] \rangle_t, \quad (B.3)$$

den wir nun berechnen wollen (vgl. (7.12)). Dazu sind die Teilchen-Operatoren ins Quasiteilchenbild zu transformieren

$$c_{\vec{k}}^+ = u_{\vec{k}}^* \bar{c}_{\vec{k}}^+ + v_{\vec{k}}^* \bar{c}_{-\vec{k}} + \zeta^* \delta_{\vec{k}0}, \quad (B.4)$$

in dem sich Zeitabhängigkeiten auf Exponentialfaktoren reduzieren:

$$\bar{c}_{\vec{k}}^+(\tau) = \exp(iE_{\vec{k}}\tau) \bar{c}_{\vec{k}}^+. \quad (B.5)$$

Die einzigen Erwartungswerte von Kommutatoren, die nicht verschwinden, sind Terme mit gleich viel Quasiteilchen-Erzeugungs- und -Vernichtungs-Operatoren. Folgende Typen treten auf, von denen wir zwei exemplarisch berechnen wollen (die Indices "k + q" stehen für $|\vec{k} + \vec{q}|$!)

$$\begin{aligned} A_{11} &\equiv u_{\vec{k}}^* u_{\vec{k}+\vec{q}} u_{\vec{p}}^* u_{\vec{p}-\vec{q}} \exp[i(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}})\tau] \langle [\bar{c}_{\vec{k}}^+ \bar{c}_{\vec{k}+\vec{q}}, \bar{c}_{\vec{p}}^+ \bar{c}_{\vec{p}-\vec{q}}] \rangle_t \\ &= \dots \exp[\dots] \langle \bar{c}_{\vec{k}}^+ \delta_{\vec{k}+\vec{q}, \vec{p}} \bar{c}_{\vec{p}-\vec{q}} - \bar{c}_{\vec{p}}^+ \delta_{\vec{k}+\vec{q}, \vec{p}} \bar{c}_{\vec{k}+\vec{q}} \rangle_t \\ &= |u_{\vec{k}}|^2 |u_{\vec{k}+\vec{q}}|^2 \exp[i(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}})\tau] (\bar{n}_{\vec{k}} - \bar{n}_{\vec{k}+\vec{q}}) \delta_{\vec{k}+\vec{q}, \vec{p}} \end{aligned} \quad (B.6)$$

$$\begin{aligned}
 A_{12} &\equiv u_k^* u_{k+q} v_p^* v_{p-q} \exp[i(E_k - E_{k+q})\tau] \langle [\bar{c}_k^+ \bar{c}_{k+q}, \bar{c}_{-p} \bar{c}_{-p+q}^+] \rangle_t \\
 &= \dots \exp[\dots] \langle \bar{c}_k^+ \delta_{k,-p} \bar{c}_{-p} - \delta_{k,-p} \bar{c}_{-p+q}^+ \bar{c}_{k+q} \rangle_t \\
 &= u_k^* v_k^* u_{k+q} v_{k+q} \exp[i(E_k - E_{k+q})\tau] (\bar{n}_k - \bar{n}_{k+q}) \delta_{k,-p}, \quad (B.7)
 \end{aligned}$$

usw.

Daneben treten noch Erwartungswerte des Typs $\langle [\bar{c}^+ c^+, \bar{c} \bar{c}] \rangle_t$,

$N_0 \langle [\bar{c}^+, \bar{c}] \rangle_t$ usw. auf.

Durch Auswertung der Kroneckersymbole läßt sich eine Summation (z.B. über $\vec{p}$) durchführen. An dieser Stelle tritt nun ein Unterschied zwischen der Dichte- und der Strom-Korrelationsfunktion auf. Die Faktoren $\delta_{\vec{k}+\vec{q},\vec{p}}$ und $\delta_{\vec{k},-\vec{p}}$ führen bei D^R zu Termen der Form

$$|u_k|^2 |u_{k+q}|^2 + u_k^* v_k^* u_{k+q} v_{k+q} = (4 E_k E_{k+q})^{-1} \{ (\tilde{\epsilon}_k + E_k)(\tilde{\epsilon}_{k+q} + E_{k+q}) + \Delta_k^* \Delta_{k+q} \}, \quad (B.8)$$

während bei der Strom-Korrelationsfunktion ein Vorzeichenwechsel beim letzten Term auftritt

$$\begin{aligned}
 P_{lm}^R(\vec{q}\tau) &\sim \sum_{\vec{l}, \vec{p}} (\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2})_l (\vec{p} - \frac{\vec{q}}{2})_m \{ |u_k|^2 |u_{k+q}|^2 \delta_{\vec{p}, \vec{k}+\vec{q}} + \delta_{\vec{p}, -\vec{k}} u_k^* v_k^* u_{k+q} v_{k+q} \} \\
 &= \sum (\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2})_l (\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2})_m \{ |u_k|^2 |u_{k+q}|^2 - u_k^* v_k^* u_{k+q} v_{k+q} \} \\
 &= \sum (\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2})_l (\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2})_m \frac{(\tilde{\epsilon}_k + E_k)(\tilde{\epsilon}_{k+q} + E_{k+q}) - \Delta_k^* \Delta_{k+q}}{4 E_k E_{k+q}}. \quad (B.9)
 \end{aligned}$$

Nach Verschieben der Summationsvariablen $\vec{k} \rightarrow \vec{k}' = \vec{k} + \frac{\vec{q}}{2}$ (und Weglassen des Strichs), Übergang in die Frequenzdarstellung, Zusammenfassen von Termen und Wahl von reellen Kohärenzparametern erhalten wir schließlich die Endergebnisse

$$D^R(q, z) = T_1^+(q, z) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \{ T_2^+(\vec{k}, \vec{q}, z) + T_3^+(\vec{k}, \vec{q}, z) \}, \quad (B.10)$$

$$P_{lm}^R(\vec{q}, z) = \left(\frac{e\hbar}{m}\right)^2 \left\{ \frac{1}{4} q_l q_m T_1^-(q, z) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} k_l k_m [T_2^-(\vec{k}, \vec{q}, z) + T_3^-(\vec{k}, \vec{q}, z)] \right\}, \quad (\text{B.11})$$

mit

$$T_1^\pm(q, z) \equiv -\frac{N_0}{E_q} (\tilde{\epsilon}_q \mp \Delta_q) \left\{ \frac{1}{z + E_q} - \frac{1}{z - E_q} \right\}, \quad (\text{B.12})$$

$$T_2^\pm(\vec{k}, \vec{q}, z) \equiv +\frac{1}{2} (\bar{n}_- - \bar{n}_+) \left(\frac{\tilde{\epsilon}_- \tilde{\epsilon}_+ \pm \Delta_- \Delta_+}{E_- E_+} + 1 \right) \left\{ \frac{1}{z + (E_- - E_+)} - \frac{1}{z - (E_- - E_+)} \right\}, \quad (\text{B.13})$$

$$T_3^\pm(\vec{k}, \vec{q}, z) \equiv -\frac{1}{2} (\bar{n}_- + \bar{n}_+ + 1) \left(\frac{\tilde{\epsilon}_- \tilde{\epsilon}_+ \pm \Delta_- \Delta_+}{E_- E_+} - 1 \right) \left\{ \frac{1}{z + (E_- + E_+)} - \frac{1}{z - (E_- + E_+)} \right\} \quad (\text{B.14})$$

und den Index-Abkürzungen

$$\pm \triangleq |\vec{k} \pm \vec{q}/2|.$$

Die Symmetrie in $\vec{q}$ folgt unmittelbar daraus, daß alle Terme nur von $q = |\vec{q}|$ oder von $|\vec{k} \pm \vec{q}/2|$ abhängen.

Die hier abgeleiteten retardierten Korrelationsfunktionen für ein kondensiertes Bose-System haben eine ähnliche Struktur wie die entsprechenden Korrelationsfunktionen für ein supraleitendes Fermi-System. Die Strom-Korrelationsfunktion lautet (vgl. etwa Glg. (52.29) Fetter/Walecka²⁷⁾)

$$P_{lm}^R(\vec{q}, \omega) = \left(\frac{e\hbar}{m}\right)^2 \sum_{\vec{p}} p_l p_m \{S_2^- + S_3^-\} \quad (\text{B.15})$$

mit

$$S_2^\pm \equiv +\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_- \xi_+ \mp \Delta^2}{E_- E_+} \right) (\bar{f}_- - \bar{f}_+) \{ \text{Nenner wie } T_2^\pm \} \quad (\text{B.16})$$

$$S_3^\pm \equiv -\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_- \xi_+ \mp \Delta^2}{E_- E_+} \right) (1 - \bar{f}_- - \bar{f}_+) \{ \text{Nenner wie } T_3^\pm \} \quad (\text{B.17})$$

Die retardierte Dichte-Korrelationsfunktion ist im selben Lehrbuch (nach Aufg. (13.19) und Einsetzen von u_+, v_+ sowie analytischer Fortsetzung $i v_n \rightarrow \omega + i\epsilon = z$) angegeben als

$$D^R(\vec{q}, z) = \sum_{\vec{k}} \{ S_2^+ + S_3^+ \}. \quad (B.18)$$

Hier stehen jeweils $\bar{f}_{\pm}$ für die Fermi-Besetzungszahlfunktionen zu $E_{\pm}$. Der Kohärenzparameter Δ ("Energiespalte") ist impulsunabhängig, und $\xi_{\pm} = (\vec{k} \pm \vec{q}/2)^2 / (2m) - \mu$. Wenn man sich noch überlegt, daß im supraleitenden Fermi-System die folgenden in Tab. III aufgelisteten Beziehungen gelten (zum Vergleich sind die analogen Größen im Bose-System gegenübergestellt - alle Größen sind reell gewählt), sieht man durch Vergleich sofort, daß sich $T_2^{\pm}$ und $S_2^{\pm}$ sowie $T_3^{\pm}$ und $S_3^{\pm}$ völlig entsprechen, während der Term $T_1^{\pm}$ nur in einem Bose-System mit c-Zahl-Kondensat $\sim N_0$ existiert. Weiterhin werden im (Spin = $\frac{1}{2}$) Fermisystem die Terme unter den $\vec{k}$ -Summen wegen $2s + 1 = 2$ doppelt gezählt.

$E_k^2 = \xi_k^2 + \Delta^2 \geq \xi_k^2$ $u_k^2 = \frac{1}{2} (1 + \xi_k / E_k)$ $v_k^2 = \frac{1}{2} (1 - \xi_k / E_k)$ $ u_k ^2 + v_k ^2 = 1$ $\langle \bar{b}_k \bar{b}_k^+ \rangle = 1 - \langle \bar{b}_k^+ \bar{b}_k \rangle = 1 - \bar{f}_k$ Fermi	$E_k^2 = \tilde{\xi}_k^2 - \Delta_k^2 \leq \tilde{\xi}_k^2$ $u_k^2 = \frac{1}{2} (\tilde{\xi}_k / E_k + 1)$ $v_k^2 = \frac{1}{2} (\tilde{\xi}_k / E_k - 1)$ $ u_k ^2 - v_k ^2 = 1$ $\langle \bar{c}_k \bar{c}_k^+ \rangle = 1 + \langle \bar{c}_k^+ \bar{c}_k \rangle = 1 + \bar{n}_k$ Bose
--	---

Tab. III: Gegenüberstellung entsprechender Größen

Herrn Prof.Dr. H. Haug danke ich für sein beständiges Interesse am Fortgang dieser Arbeit und für viele nützliche Anregungen und Hinweise, die mich davon abhielten, zuviel Zeit in Irrwege zu investieren. Darüber hinaus schulde ich ihm Dank für die Chance eines "physikalischen Neubeginns" nach Abschluß meiner praktisch-pädagogischen Lehrerausbildung.

Finanzielle Unterstützung wurde mir gewährt vom Sonderforschungsbereich 65 Frankfurt-Darmstadt während des ersten halben Jahres meines Aufenthalts in Frankfurt.

Für die numerischen Rechnungen stand mir Rechenzeit auf dem Rechner der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) in Darmstadt zur Verfügung.

L E B E N S L A U F

- 15.05.1947 Geboren in Bremen. Eltern: Rudolf und Anna Dörre, geb. Rosenkranz.
- April 1953 Einschulung - Grundschulbesuch - Schüler des Gymnasiums am Leibnizplatz in Bremen (mathematisch-naturwissenschaftlicher Zweig). Abitur.
-
- 02.03.1966
- 04.04.1966 Eintritt in die Bundeswehr als Soldat auf Zeit.
- 03.04.1969 Entlassung als Leutnant der Reserve.
- April 1969 Physikstudium an der Universität Hamburg.
Nach dem Vordiplom: Schwerpunkt Theoretische Physik, daneben Vorlesungen in Mathematik und Informatik. Diplomarbeit in Statistischer Physik "Selbstkonsistente Berechnung des thermodynamischen Potentials für supraflüssiges Helium 3" bei Prof. Dr. L. Tewordt.
- 03.01.1975 Tätigkeit als wissenschaftliche Hilfskraft.
- 28.04.1975 Diplom in Physik, Nebenfach Angewandte Mathematik.
- 01.08.1975 Vorbereitungsdienst für das Lehramt an Gymnasien (Studienreferendar) mit den Fächern Physik und
-
- 31.01.1977 Mathematik. 2. Staatsexamen.
- 02.10.1975 Verheiratet mit Hildburg Schunck, Studienrätin, aus Hamm/Westfalen.
- 15.02.1977 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Theoretische Physik (Prof. Dr. H. Haug) der Universität Frankfurt. Beginn der Arbeit an einer Dissertation.

